



Mejora de un código hidrodinámico con transporte de radiación en malla adaptativa refinada (AMR) y su aplicación a los láseres de rayos X inyectados.
Amélioration d'un code hydrodynamique avec transport de rayonnement et maillage avec raffinement adaptatif (AMR) et son application aux laser X

Eduardo Oliva

► **To cite this version:**

Eduardo Oliva. Mejora de un código hidrodinámico con transporte de radiación en malla adaptativa refinada (AMR) y su aplicación a los láseres de rayos X inyectados. Amélioration d'un code hydrodynamique avec transport de rayonnement et maillage avec raffinement adaptatif (AMR) et son application aux laser X. Physique [physics]. Ecole Polytechnique X, 2010. Français. NNT: . pastel-00006310

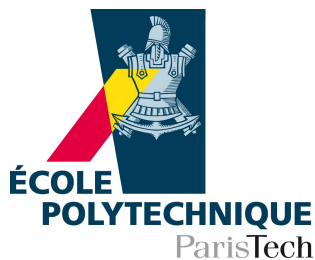
HAL Id: pastel-00006310

<https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00006310>

Submitted on 27 Sep 2010

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Thèse présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'ÉCOLE POLYTECHNIQUE

Spécialité: Physique – Polytechnique

par

Eduardo OLIVA

**Mejora de un código hidrodinámico con transporte de radiación en
malla adaptativa refinada (AMR) y su aplicación a los láseres de rayos
X inyectados**

**Amélioration d'un code hydrodynamique avec transport de
rayonnement et maillage avec raffinement adaptatif (AMR) et son
application aux lasers X**

Soutenue le 1 juillet 2010 devant le jury composé de:

Emilio MÍNGUEZ
Philippe ZEITOUN
Marta FAJARDO
Patrick SAUVAN
Berta GÁMEZ

Universidad Politécnica de Madrid
LOA, École Polytechnique, Palasieau
Instituto Superior Técnico, Lisboa
U.N.E.D. , Madrid
Universidad Politécnica de Madrid

Rapporteur
Directeur de thèse

Rapporteur

Agradecimientos

Si resumir cuatro años de trabajo en 250 páginas y 50 minutos es una tarea complicada, reconocer los méritos de todas las personas que han hecho posible esta tesis en un folio raya lo imposible. Aún así y quizá por mero espíritu de contradicción voy a intentarlo.

En primer lugar, es menester agradecer al Departamento de Ingeniería Nuclear y al Instituto de Fusión Nuclear y, en su nombre, a Carolina Ahnert y José Manuel Perlado como directores de los mismos por poner a mi disposición los medios necesarios. Así mismo, quiero hacer extensivo el agradecimiento a todos los miembros de ambas instituciones, por acogerme y compartir sus conocimientos y anécdotas conmigo.

Merci, obrigado, thanks, díky, danke a todos con los que he compartido cervezas a lo largo y ancho de Europa aunque quiero agradecer especialmente a toda la gente del Laboratoire d'Optique Appliquée y del LIXAM (ahora LASERIX) su acogida durante mi estancia. ¡Pronto nos veremos otra vez!

Gracias a mis amigos: Rubén, Santiago, David, Rosa, Ana, Teje, Peña, Octavio y un largo etc... en Guadalajara, Alcalá, Madrid y Fuente-Tóvar. Vosotros siempre me habéis apoyado y animado. Habéis estado siempre ahí y me habéis tendido una mano (o una copa) amiga cuando lo necesitaba. Cualquier cosa que diga aquí no será suficiente para expresar cuanto os agradezco vuestra confianza.

Y gracias también a los que, además de amigos, son (o han sido) compañeros de trabajo: Fernando y Miguel (esas partidas de rol), Carlos (esos desayunos), Javi (las bromas, las fiestas de Torrejón, el Catán, el Fuente-Tóvar Engineering Meeting...), Alain (el viaje por ese maravilloso país que es México), Elena (pronto otro GEMSE), José Javier (los vídeos de youtube), Juan Andrés, Matthias, Diego, Manuel, David, Alberto (dos Albertos mejor dicho), Nuria, Raquel y alguno que posiblemente me olvide. Aún a riesgo de ganarme enemistades, habéis sido sin duda lo mejor de esta tesis.

Por supuesto, tengo que agradecer a mis directores de tesis todo el esfuerzo y trabajo que me han dedicado. Gracias, Pedro, por descubrirme mi verdadera vocación allá por el 2003 (y algunos cómics y libros de ciencia

ficción más tarde) y darme la oportunidad de llevarla a cabo trabajando contigo. Philippe, muchas gracias por esos meses de estancia en Francia, por las oportunidades que me has dado y por descubrirme el submarinismo y la comida japonesa (bueno, por esto último no).

Muchas, muchas, muchas gracias a mis padres, Anastasio y Elena, a mi hermano Jesús y a mi tía Leonor por aguantar mis malos modos cuando algo no iba bien, por ayudarme y apoyarme en todo y poner buena cara cada vez que me iba de viaje. Vuestros consejos, vuestro ejemplo, los valores que me habéis inculcado... en resumen, gracias de todo corazón. También quiero agradecer a mis abuelos Constantino, Paula, Valentín y Rosa el tiempo que me dedicaron de pequeño y de no tan pequeño. Por desgracia, ninguno ha podido ver el final de esta tesis que tanto les debe a ellos. Gracias.

Ana, te he dejado para el final, o casi, porque si los compañeros del departamento han sido lo mejor de la tesis, tú has sido lo mejor de estos años. Te quiero. Gracias por tu apoyo, tu sentido del humor, por ponerme los pies en el suelo de vez en cuando y sacarme de viaje y por... son tantas cosas que mejor te las digo en persona.

Finalmente, gracias a Goscinny y Uderzo por ayudarme a tomar con humor la búsqueda del pase A 38.

Resumen

En la actualidad existe un gran interés en el desarrollo de fuentes brillantes de radiación X blanda coherente. Diversas fuentes, como los Láseres de Electrones Libres (FEL), láseres de rayos X basados en plasmas inyectados o Armónicos de Alto Orden están disponibles actualmente para diversas aplicaciones en diversos campos como la biología [9] o la física [41]. Sin embargo, muchos experimentos que tratan de romper los límites del estado del arte actual en estos campos sólo se pueden realizar en láseres de electrones libres ya que requieren energías mayores de $10 \mu J$ por pulso para obtener intensidades ultra-altas [103], por encima de $10^{16} W/cm^2$ o para realizar imágenes con un solo disparo [15] de muestras que evolucionan en escalas de femtosegundos. Dentro de las citadas fuentes de radiación X coherente, los láseres basados en plasmas son realmente atractivos ya que permiten obtener las energías más altas, hasta 10 mJ por pulso [87], sin embargo la coherencia es bastante baja, emitiendo pulsos de cientos de picosegundos de duración. Esta larga duración y la baja calidad óptica de estos pulsos impiden usar estos láseres en las aplicaciones más excitantes. Una manera de mejorar la coherencia, el frente de onda y reducir la duración de estos pulsos, manteniendo la energía a niveles altos consiste en inyectar un amplificador basado en plasma con Armónicos de Alto Orden [21, 110, 106, 105, 39, 73, 104].

Como era de esperar, la inyección de armónicos en amplificadores gaseosos da lugar a haces de gran calidad, con un alto grado de coherencia, polarización [110] y un frente de ondas limitado por la difracción [30]. Sin embargo, el pulso todavía es demasiado largo temporalmente, alrededor de 5 ps y la energía medida es de aproximadamente $1 \mu J$ por pulso [110]. Ya que los amplificadores basados en blancos sólidos son más densos que los generados a partir de gases, es de esperar que la energía obtenida sea mayor y la duración de los pulsos menor. Sin embargo, los experimentos realizados hasta la fecha no han obtenido energías superiores a los 90 nJ ni pulsos sensiblemente inferiores a 1 ps [104]. Estos resultados muestran la necesidad de un estudio teórico de la inyección de armónicos en plasmas amplificadores creados a partir de blancos sólidos, que nos permita comprender los resul-

tados experimentales y, a su vez, optimizar los amplificadores para obtener mayores energías y pulsos más cortos.

Recientemente se ha realizado un estudio teórico que explicaría la razón de la larga duración temporal de estos pulsos a la vez que se indica una manera de obtener pulsos de 100 fs e incluso más cortos [107]. En esta tesis nos hemos centrado en el problema de la diferencia entre la energía extraída y la predicha, con la meta de producir láseres basados en la inyección de armónicos en plasmas que emitan decenas de microjulios por pulso. Para el estudio y optimización de estos amplificadores, se ha usado el código ARWEN [64]. Este código ya había sido usado previamente en este campo [14], pero ha sido mejorado en el marco de esta tesis para aumentar sus capacidades en sus campos de aplicación. Así pues, en esta tesis se presenta:

- Estudio teórico de las principales fuentes de radiación X coherente, haciendo hincapié en los láseres de rayos X basados en plasmas. El estado del arte así como la física de estos amplificadores son tratados con mayor profundidad.
- Descripción del código ARWEN, herramienta fundamental para el estudio de los plasmas amplificadores y de las mejoras introducidas en el código en el marco de esta tesis (trazado de rayos, paralelización de la conducción, salida en formato HDF, etc...). Así mismo se explican los programas usados en el postproceso de datos, necesario para el estudio de estos amplificadores
- Optimización de los amplificadores mediante simulaciones realizadas con ARWEN. Estas simulaciones parte de trabajos anteriores [14] y continúan el trabajo realizado, explicando los efectos que dan lugar a las diferencias de energías observadas experimentalmente y predichas teóricamente y proponiendo maneras de evitar estas pérdidas de energía, optimizando el blanco. Se presenta a su vez un estudio de la amplificación del haz en dichos blancos, observándose la necesidad de un pre-amplificador.

Así pues, en la actualidad se dispone de un código (ARWEN) con nuevas capacidades de simulación que pueden ser aplicadas a diversos campos (no solo a los láseres de rayos X) y que ha sido utilizado para estudiar la física de los amplificadores de radiación X coherente basados en plasmas. Esto ha permitido entender la evolución de estos amplificadores, explicando las diferencias encontradas entre experimentos y teoría, proponiendo a su vez una manera de reducir las pérdidas de energía en estos amplificadores.

Summary

There is much interest in developing high brightness sources of coherent soft X-ray radiation. Free Electron Lasers (FEL), seeded plasma-based soft X-ray lasers or High Harmonics are currently available for applications in various fields from Biology [9] to Physics [41]. However, many breakthrough experiments envisaged today are demonstrated only on FEL since they require energy per pulse exceeding $10 \mu J$ to produce ultra-high intensity [103] near or above $10^{16} W/cm^2$ or to perform single-shot images [15] of samples evolving at femtosecond time scale. Within the panorama of intense soft x-ray sources, plasma-based soft x-ray lasers are very attractive since they demonstrated the highest energy per pulse, up to 10 mJ [87], however from a weakly coherent source, emitting hundred picosecond pulses. Their long pulse duration and poor optical qualities prevent from using plasma-based soft x-ray lasers on the most exciting applications. A promising way to obtain sources of required temporal and optical parameters, while obtaining the high energy output of soft X-ray lasers consists on Seeding a plasma amplifier with High Harmonics radiation [21, 110, 106, 105, 39, 73, 104].

As expected seeding experiments achieved with gas amplifiers demonstrated high quality beams with high degree of coherence, fully polarized [110] and diffraction-limited wavefront [30]. However, the pulse duration has been estimated to be still long, around 5 ps and energy has been measured around $1 \mu J$ per pulse [110]. Since amplifiers based on solid targets are denser than those generated from gas, higher energy and shorter pulse durations were expected. However, experiments demonstrated lower energy around 90 nJ and slightly shorter pulse duration down to 1 ps [104]. Deeper studies of the injection and amplification processes in solid targets are thus needed, in order to understand the experiments and optimize the amplifiers, to obtain higher energies and shorter pulses.

A recent theoretical study explained the reason why pulse duration was still in the picosecond range and gives way to achieve 100 fs and shorter pulses [107]. We thus concentrated this thesis on the understanding of the mismatch between expected and measured energies for solid targets with the

goal to find a way for producing seeded plasma-based soft x-ray laser emitting tens of microjoules per pulse as required by many applications. This work has been done with the code ARWEN [64]. This code had already been used in this field [14] but it has been improved in the frame of this thesis, adding new computational capabilities. The work presented in this thesis is:

- Theoretical study of coherent X-ray sources, emphasizing the plasma-based sources. The state of the art and the physics of these amplifiers are described more thoroughly.
- Description of the ARWEN code, the fundamental tool of this work, and the improvements introduced in it (ray tracing, parallelization of thermal conduction subroutines, standard HDF output, etc...). In addition to this, the codes used for postprocessing the data are also described.
- Optimization of plasma amplifiers by means of numerical models. These studies start from previous works [14], continuing the work and explaining the effects that lead to the differences between the predicted energy and the energy experimentally observed. Some ways to avoid these effects are proposed. An study of the amplification of the injected seed in these plasmas is also presented, concluding that pre-amplifier stages are essential.

Thus, nowadays a code with new simulation capabilities (ARWEN) is available and it can be applied to several fields (not only plasma-based soft X-ray lasers). It has been used to study plasma-based amplifiers, gaining an insight into the physics of these systems, explaining the differences between experimental results and theoretical predictions. In addition to this, it has been proposed a new scheme to optimize these amplifiers.

Résumé

Le développement de sources X brillantes et cohérentes suscite actuellement un grand intérêt. Il en existe de nombreuses versions comme les FEL (Free Electron Lasers), les harmoniques d'ordre élevé ou encore les laser à rayons X basés sur des plasmas chauds injectés par ces mêmes harmoniques. Ils sont disponibles pour diverses applications dans la biologie [9] ou la physique [41]. Cependant, parmi les expériences qui envisagent de dépasser l'état de l'art actuel, certaines ne peuvent être réalisées qu'avec des FELs car il est nécessaire d'utiliser des énergies supérieures à $10 \mu J$ par impulsion pour obtenir des intensités ultra-élevées [103], (au-delà de $10^{16} W/cm^2$) ou encore pour réaliser l'imagerie mono-impulsionnelle [15] d'échantillons qui évoluent sur des échelles de temps femtosecondes. Entre toutes les sources nommées initialement, les laser basés sur des plasmas sont particulièrement attrayants car ils permettent d'obtenir les énergies les plus élevées : plus de 10 mJ par impulsion [87], néanmoins avec une cohérence faible et une durée d'émission de quelques centaines de picosecondes. La longue durée et la faible qualité optique de ces impulsions empêchent l'utilisation de ces laser dans les applications les plus intéressantes. L'injection d'harmoniques d'ordre élevé dans le plasma amplificateur permet d'améliorer la cohérence et réduire la durée des impulsions en conservant des énergies élevées [21, 110, 106, 105, 39, 73, 104].

Comme prévu, l'injection d'harmoniques dans des amplificateurs gazeux génère des faisceaux de grand qualité, ayant une cohérence élevée, polarisés [110] et un front d'ondes limité par la diffraction [30]. Toutefois l'impulsion est trop longue, de l'ordre de 5 ps et possède une énergie, mesurée, de $1 \mu J$ [110]. Puisque les amplificateurs basés sur cible solide sont plus denses que ceux générés sur cible gazeuse, des impulsions d'énergie supérieure et plus courtes sont attendue. Cependant, les expériences réalisées n'ont pas présenté d'énergies supérieures à 90 nJ et des durées inférieures à 1 ps [104]. Ces résultats montrent le besoin d'études théoriques sur l'injection d'harmoniques pour comprendre les expériences et optimiser les amplificateurs puis augmenter l'énergie et réduire la durée des impulsions.

Une explication de la durée élevée des impulsions et une manière de rédui-

re cette durée pour obtenir des impulsions de moins de 100 fs ont été publiées récemment [107]. Dans cette thèse nous nous sommes concentrés sur le problème de la différence entre l'énergie extraite et celle prédite, avec pour objectif d'obtenir des faisceaux de quelques dizaines de microjoules par impulsion. Nous avons employé le code ARWEN [64], déjà utilisé dans ce domaine [14], et l'avons amélioré dans le cadre de cette thèse. Les travaux réalisés sont donc :

- L'étude théorique des sources de rayonnement X cohérent, en insistant sur les sources basées sur plasmas. L'état de l'art et la physique de ces amplificateurs sont décrits en profondeur.
- La description du code ARWEN et des améliorations introduites dans le cadre de cette thèse. Ainsi que les programmes utilisés pour le post-process des données.
- L'optimisation des amplificateurs au moyen de simulations numériques. Ces simulations continuent les travaux précédentes [14] et expliquent les effets donnant lieu aux différences entre l'énergie obtenue expérimentalement et celle prédite théoriquement. En prenant en compte ces effets, nous proposons un amplificateur optimisé. Nous avons aussi étudié l'amplification du faisceau harmonique en concluant au besoin d'un pré-amplificateur.

En résumé, nous avons amélioré le code ARWEN en ajoutant de nouvelles capacités de simulation et l'avons utilisé pour étudier la physique des amplificateurs de rayonnement X cohérent basés sur plasmas. L'évolution de ces plasmas a été comprise et nous a permis d'expliquer les différences entre les expériences et la théorie et proposer un moyen de réduire les pertes d'énergie.

Introducción

En este año, 2010, se cumplen 50 años desde la construcción del primer dispositivo láser, realizado por Theodore Maiman, y 25 años desde la primera demostración de la técnica CPA (*Chirped Pulse Amplification* [91], por Donna Strickland y Gerard Mourou) que ha resultado ser fundamental para la obtención de pulsos láser ultra-intensos y también 25 años desde la demostración del láser de rayos X blandos [57, 86, 92] del cual nos ocuparemos en esta tesis. Así mismo, este año también verá avances revolucionarios en este campo, ya que a finales del 2009 comenzó a funcionar el primer láser de rayos X con longitudes de onda por debajo del Angstrom, el *Linear Coherent Light Source* LCLS [1] del SLAC National Accelerator Laboratory

Así pues, desde que en 1960 se utilizara por primera vez un láser de rubí hasta la actualidad, se han realizado espectaculares avances, existiendo una amplia gama de dispositivos láser que nos permiten obtener pulsos con diferentes propiedades (energía, duración temporal, longitud de onda, etc ...) Cabría preguntarse por la necesidad de alcanzar longitudes de onda más pequeñas y por qué usar láseres en lugar de usar fuentes incoherentes de radiación X, disponibles desde hace tiempo en el mercado.

Respecto a la longitud de onda, existen diversas razones, dependiendo de la aplicación, que hacen fundamental reducirla. En términos generales, la resolución de una imagen depende directamente de la longitud de onda. Así pues, para obtener imágenes de nanoobjetos, ya sea en el campo de la biología o de la nanotecnología por ejemplo, es necesario utilizar radiación.

El uso de longitudes de onda más cortas abre también nuevos caminos en la física atómica: los fotones de láseres convencionales interaccionan con los electrones de valencia, siendo esta interacción diferente según los materiales (conductores, semiconductores y aislantes). Sin embargo, el uso de longitudes de onda del orden del nanómetro permitirá a estos fotones interaccionar con los electrones de capas internas, lo que representará un gran avance en el campo de la física atómica.

Así mismo, la física de plasmas y tecnologías derivadas (como la Fusión por Confinamiento Inercial) se verá beneficiada por el uso de rayos X

coherentes, principalmente para la diagnosis de plasmas. La radiación electromagnética puede propagarse en un plasma a través de densidades electrónicas inferiores a cierto valor crítico. Este valor, conocido como *densidad crítica* es inversamente proporcional a la longitud de onda al cuadrado de la radiación. Además, la absorción de radiación por el mecanismo de Bremsstrahlung Inverso también depende del inverso del cuadrado de la longitud de onda, por lo que el uso de rayos X permite diagnosticar plasmas densos y hacerlo de una manera más eficiente que si se usaran radiaciones de mayor longitud de onda.

Hasta aquí se han enumerado diversas ventajas del uso de longitudes de onda en el rango de los rayos X blandos en algunos de los múltiples campos de aplicación de los rayos X. Una vez justificados los avances hacia longitudes de onda más pequeñas hay que preguntarse por qué usar láseres en lugar de otras fuentes de rayos X disponibles en el mercado. La respuesta a esto se debe a las propiedades ópticas características de los láseres que no se obtienen con otras fuentes, como son la coherencia, polarización y la focalización. El disponer de un haz coherente permite usar técnicas como la interferometría o la holografía para obtener imágenes tridimensionales de objetos o mapas de propiedades de los plasmas de una manera relativamente fácil. Un haz focalizable, hasta el límite impuesto por la difracción, permite alcanzar grandes intensidades en el blanco, con múltiples aplicaciones en campos que van desde la nanotecnología (ablación) a la física moderna (QED).

Una vez justificada la necesidad de avanzar en el desarrollo de nuevos sistemas láser nos centraremos en los láseres de rayos X y en sus aplicaciones en particular. Las longitudes de onda de estos láseres, del orden de nanómetros o inferiores, los hacen ideales para el estudio de macromoléculas o células. Sin embargo, la cantidad de fotones requeridos para obtener una imagen (alrededor de 200 fotones por $\circ A^2$ con $\lambda = 0,1nm$ destruyen en decenas de femtosegundos las muestras por mecanismos como la explosión Coulombiana. Para obtener imágenes nítidas de estos objetos es necesario utilizar pulsos de rayos X con el suficiente número de fotones y una duración de varios femtosegundos, de tal manera que se obtenga la imagen antes de que el blanco quede destruido [60].

En la actualidad, sólo hay dos fuentes de radiación X coherente que permitan la obtención de pulsos de varios femtosegundos y una energía en el blanco de $\approx 0,1mJ$: el recién inaugurado LCLS y FLASH [7] (DESY, Hamburgo). Hay que notar que los pulsos de FLASH son de rayos X blandos, con longitudes de onda entre $\lambda = 6 - 30nm$ (recordemos que LCLS es el primer FEL que alcanza longitudes de onda por debajo del Angstrom). Estas mayores longitudes de onda hacen que los objetos que se pueden estudiar sean más grandes (decenas de nanómetros) y que éstos evolucionen más lentamen-

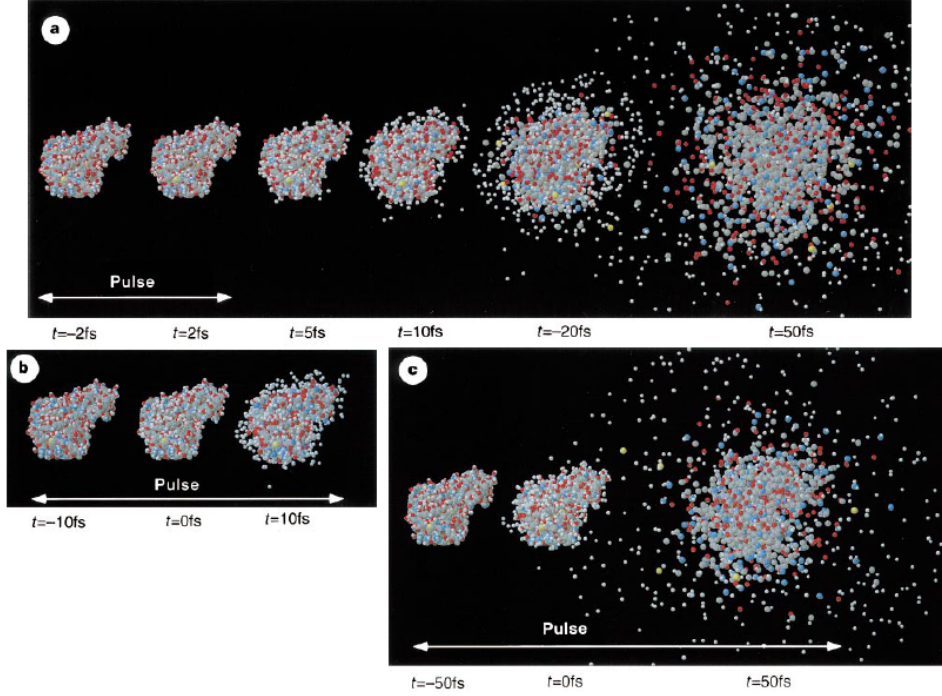


Figura 1: Explosión de la enzima T4 lisozima (blanco H, gris C, azul N, rojo O, amarillo S) inducida por el daño producido por la radiación. Las posiciones atómicas no varían mientras el pulso actúa cuando este es corto (2 fs, figura a), mientras que cuando éste es más largo se inicia la explosión antes de acabar el pulso, perdiendo resolución. Obtenido de [60]

te, siendo suficiente con el uso de pulsos de 100 fs. En estas instalaciones se han demostrado aplicaciones como las anteriormente nombradas [16]. Sin embargo, estos láseres de rayos X son instalaciones singulares muy costosas que están al alcance de muy pocos laboratorios en todo el mundo. Por ello es necesario buscar otras fuentes de radiación X coherente que cumplan los requisitos necesarios para llevar a cabo los experimentos y, a su vez, sean más sencillas y baratas.

Una posible solución a este problema surge de combinar las otras dos fuentes de radiación X blanda intensas disponibles en la actualidad: los láseres basados en plasmas y los armónicos de alto orden (*High Order Harmonics* HOH). Ninguna de estas dos fuentes por separado cumplen todos los requisitos: los láseres basados en plasma, a pesar de obtener la máxima energía en este rango de longitudes de onda (hasta 10 mJ), presentan una pobre coherencia, por debajo de las necesidades experimentales, mientras que los armónicos de alto orden, a pesar de ser muy coherentes y estar polariza-

dos, no permiten obtener haces de alta energía. Sin embargo, la inyección de armónicos en un plasma amplificador combina las ventajas de ambas fuentes y no se requiere una instalación extremadamente costosa. La meta a alcanzar con este esquema serían energías y duraciones que permitan realizar las aplicaciones que actualmente sólo pueden hacerse en FEL como FLASH: 0.1 mJ y 100 fs.

El primer intento de inyección [21] no tuvo el éxito esperado, obteniendo una amplificación demasiado pequeña. Hubo que esperar nueve años hasta que el tremendo potencial de la inyección de armónicos fuese demostrado por el equipo de Philippe Zeitoun [110]. La inyección de un haz de armónicos en un amplificador gaseoso (*Optical Field Ionization* OFI) permitió la obtención de pulsos con energías de $0.7 \mu\text{J}$ y duración estimada de 500 fs, conservando la coherencia y polarización del haz inyectado final.

Una vez demostrada la viabilidad de la técnica y la posibilidad de obtención de haces ultra-cortos y ultra-intensos, el siguiente paso consistía en encontrar la manera de aumentar la energía hasta las decenas de microjulios y reducir la duración del pulso hasta la centena de femtosegundos. Los pulsos láser resultantes de amplificadores gaseosos tienen una duración temporal relativamente elevada [90]. Así mismo, la energía que un gas puede almacenar es limitada debido a su baja densidad. Así pues, la solución lógica para reducir la duración y aumentar la energía es utilizar plasmas amplificadores creados a partir de blancos sólidos. Es de esperar pues que los haces resultantes de inyectar armónicos en estos plasmas tengan energías del orden de microjulios y duraciones de pocas centenas de femtosegundos. Sin embargo, los resultados experimentales hasta la fecha [105, 39, 106, 73, 104] no han logrado obtener energías superiores a los 90 nJ ni duraciones inferiores a 1 ps. Esto indica que las condiciones en las que se inyecta el haz no son bien conocidas y es necesario controlar y optimizar la evolución del plasma amplificador para inyectar de la manera adecuada.

La duración del pulso durante el proceso de amplificación puede estudiarse con el formalismo de Bloch-Maxwell, que se expondrá en capítulos posteriores. La energía que el haz inyectado extraerá del plasma depende fundamentalmente de la densidad y temperatura del plasma. Así pues, es necesario disponer de códigos hidrodinámicos que nos permitan comprender la evolución del plasma y sus propiedades. El código de referencia para el estudio de láseres de rayos X ha sido E-HYBRID [76]. E-HYBRID es un código hidrodinámico (1.5D) con paquetes de física atómica que estudia la evolución del plasma y generación de ganancia en éste. Ha sido testeado en multitud de ocasiones y los buenos resultados obtenidos le han convertido en el código de referencia en este campo. Sin embargo, una de sus limitaciones es su incapacidad de simular plasmas bidimensionales, lo cual sería deseable

para estudiar nuestro problema ya que los plasmas de $30\ \mu\text{m}$ de línea focal, utilizados en los experimentos, presentan un fuerte comportamiento 2D.

Esta carencia de códigos 2D que puedan estudiar el comportamiento del plasma y la generación de ganancia se ha intentado solucionar en esta tesis, adaptando el código ARWEN [64], usado anteriormente en el estudio de la Fusión por Confinamiento Inercial (*Inertial Confinement Fusion* ICF) [102] y de la Astrofísica de Laboratorio [100], para el estudio de los plasmas amplificadores de radiación X.

Esta tesis se ha realizado en co-tutela ya que el código ARWEN, así como el *know how* de desarrollo computacional se encuentran en el *Instituto de Fusión Nuclear* de la Universidad Politécnica de Madrid, mientras que en el *Laboratoire d'Optique Appliquée* se tiene el conocimiento tanto teórico como experimental de los plasmas amplificadores de radiación X, así como datos experimentales necesarios para el testeo del código.

El esquema de esta tesis es como sigue:

- En el capítulo 1 se hará una breve descripción de las fuentes de radiación X intensa disponibles en la actualidad (Láseres de Electrones Libres, Armónicos de Alto Orden y Láseres Basados en Plasmas) así como de algunas de sus aplicaciones.
- En el capítulo 2 se estudiará la física de los láseres X basados en plasmas: generación y evolución de plasmas creados por láser, cinética de poblaciones y transporte y amplificación de la radiación.
- En el capítulo 3 se introducirá el código ARWEN, utilizado para el estudio de plasmas. Se expondrán las técnicas numéricas de cada uno de los módulos del código así como las mejoras introducidas en el marco de esta tesis.
- En el capítulo 4 se presentarán las herramientas utilizadas para post-procesar los datos hidrodinámicos obtenidos con el código ARWEN y poder así calcular parámetros como la ganancia, fluencia de saturación así como la energía y divergencia del haz.
- En el capítulo 5 se presentan los antecedentes de esta tesis: la optimización del perfil transversal del láser, realizados por K. Cassou [12].
- En el capítulo 6 se continúa el estudio y optimización de los amplificadores, realizando simulaciones de plasmas variando la longitud focal transversal del láser, para comprender el impacto de los efectos bidimensionales en la evolución del plasma.

-
- En el capítulo 7 se estudia el impacto que tienen los defectos en el pulido del blanco y en la focalización del haz láser de cara a la creación de ganancia.
 - En el capítulo 8 se indican los trabajos que no han podido realizarse en el marco de esta tesis y las líneas a seguir en el estudio y optimización de estos plasmas
 - Finalmente, en el capítulo 9 se expone un breve resumen de las conclusiones extraídas en esta tesis.

Índice general

1. Fuentes de radiación X coherente	27
1.1. Introducción	27
1.2. Principios de funcionamiento de un láser	27
1.3. Generación de radiación X coherente	30
1.3.1. Láser de Electrones Libres	31
1.3.2. Armónicos de alto orden	38
1.3.3. Láseres X basados en plasmas	44
1.4. Métodos de creación del plasma	56
1.4.1. Descarga eléctrica	57
1.4.2. Optical Field Ionization (OFI)	58
1.4.3. Blanco sólido	59
1.5. Conclusiones	61
2. Física de los láser de radiación X blanda basados en plasmas	63
2.1. Plasmas creados por láseres intensos	63
2.1.1. La zona de densidad crítica	64
2.1.2. La zona sub-crítica	66
2.1.3. La zona de conducción	67
2.1.4. La zona comprimida	67
2.2. Interacción del láser con el plasma	68
2.2.1. Ondas electromagnéticas en un plasma	68
2.2.2. Incidencia oblicua en plasmas inhomogéneos	69
2.2.3. Absorción colisional	71
2.2.4. Excitación paramétrica	72
2.3. Creación de ganancia en un amplificador basado en plasma . .	74
2.3.1. Cinética de poblaciones	75
2.3.2. Excitación colisional	77
2.3.3. Otros mecanismos de inversión	78
2.4. Propagación y amplificación de radiación XUV	79
2.4.1. Refracción del haz de radiación X	79
2.4.2. Amplificación del haz	81

ÍNDICE GENERAL

2.4.3. Régimen de saturación	84
2.4.4. Perfil de la raya	86
2.5. Amplificación de armónicos de alto orden	92
2.6. Conclusiones	93
3. El código ARWEN	95
3.1. Introducción	95
3.2. El código ARWEN	95
3.3. Resolución de las ecuaciones de fluidos	97
3.3.1. Resolución numérica: el método de Godunov	99
3.4. Resolución de la ecuación de conducción térmica	104
3.5. Resolución de la ecuación de transporte de radiación	105
3.6. El método AMR: <i>Adaptive Mesh Refinement</i>	107
3.7. Otros módulos	111
3.7.1. Deposición de energía del láser	111
3.7.2. Salida en formato RWM	112
3.8. Mejoras introducidas en ARWEN en el marco de la tesis	114
3.8.1. Modelo de dos temperaturas	115
3.8.2. Deposición láser y trazado de rayos	117
3.8.3. Paralelización de la conducción térmica	122
3.8.4. Salida en formato HDF	125
3.9. Conclusiones	127
4. Postproceso de datos	129
4.1. Introducción	129
4.2. Cálculo de la ganancia	130
4.3. El Código SHADOX	132
4.3.1. La aproximación paraxial	133
4.3.2. Haces Gaussianos	134
4.3.3. El código SHADOX	136
4.4. Conclusiones	137
5. Efectos 2D: Trabajos previos	139
5.1. Introducción	139
5.2. Optimización del perfil espacial del láser	139
5.2.1. Efectos del orden n	143
5.2.2. Evolución temporal	146
5.2.3. Distribución de velocidades y estructuras laterales	149
5.2.4. Efecto de la dimensión transversal de la línea focal	152
5.2.5. Efecto del perfil espacial del láser sobre la distribución transversal de ganancia	159

5.3. Conclusión	162
6. Efectos 2D: Importancia del ancho del plasma	163
6.1. Introducción	163
6.2. Parámetros de las simulaciones	163
6.3. Resultados computaciones	165
6.4. Resultados computacionales: amplificación	175
6.5. Resultados: Hacia plasmas más anchos	182
6.6. Amplificación espectral	185
6.6.1. Casos estudiados	186
6.7. Conclusiones	194
7. Estudio del impacto de modulaciones de pequeña escala	197
7.1. Introducción	197
7.2. Rugosidad del blanco	198
7.2.1. Conclusiones	207
7.3. Inhomogeneidades en los láseres	207
7.3.1. Pulso principal	207
7.4. Conclusiones	214
8. Trabajos futuros: amplificación	215
8.1. Introducción	215
8.2. Las ecuaciones de Maxwell-Bloch	216
8.3. <i>Chirped Pulse Amplification</i>	221
8.4. Conclusiones	223
9. Conclusiones	225
9.1. Resultados de la tesis	226
9.2. Desarrollos futuros	227

Índice de figuras

1.	Explosión de la enzima T4 lisozima (blanco H, gris C, azul N, rojo O, amarillo S) inducida por el daño producido por la radiación. Las posiciones atómicas no varían mientras el pulso actúa cuando este es corto (2 fs, figura a), mientras que cuando éste es más largo se inicia la explosión antes de acabar el pulso, perdiendo resolución. Obtenido de [60]	11
1.1.	Explosión de la enzima T4 lisozima (blanco H, gris C, azul N, rojo O, amarillo S) inducida por el daño producido por la radiación. Las posiciones atómicas no varían mientras el pulso actúa cuando este es corto (2 fs, figura a), mientras que cuando éste es más largo se inicia la explosión antes de acabar el pulso, perdiendo resolución. Obtenido de [60]	32
1.2.	Diagrama del experimento de difracción. Obtenido de [16] . . .	33
1.3.	Patrones de difracción de la muestra virgen (a) y de la muestra dañada (b), realizado 20 segundos después de la primera imagen. Obtenido de [16]	33
1.4.	Imágenes de la muestra antes de irradiarla (a) y después (c) obtenidas mediante microscopía electrónica (SEM) e imagen reconstruida a partir del patrón de difracción (b) y (d) usando el algoritmo Shrinkwrap. Obtenido de [16]	34
1.5.	Representación gráfica de la función $G(x)$	37
1.6.	Armónicos de alto orden separados espacialmente.	38
1.7.	Función de onda del HOMO de N_2 . En a) se muestra la reconstrucción de la función de onda a partir del espectro de armónicos. En b) se muestra la forma del orbital obtenida con calculos <i>ab initio</i> . En c) se muestra un corte a través del eje internuclear para la función reconstruida (a rayas) y <i>ab initio</i> sólida. Imagen obtenida de [41].	39
1.8.	Modelo en tres etapas de Corkum	41
1.9.	Distribución de electrones en el primer encuentro con el ión. Figura sacada de [18].	42

1.10. Esquema de niveles simplificado del esquema de recombinación en iones litiumoides. Obtenido de [37].	47
1.11. Abundancia de iones neonoides y niqueloides para un plasma de estaño en función de la temperatura. Obtenido de [37] . . .	48
1.12. Esquema de Grotrian del Selenio neonioide. En él se muestran las tasas de excitación colisional y de emisión espontánea (entre paréntesis) para un plasma de $n_e = 5 \times 10^{20}$ y $T_e = 1keV$. Obtenido de [86]	49
1.13. Blanco usado en la demostración del laser colisional de Selenio neonioide, usando el láser Novette del LLNL. Obtenido de [40].	50
1.14. Esquema de Grotrian de iones niqueloides. Obtenido de [95]. .	51
1.15. Esquema de Grotrian del Xenon paladiumoide. Obtenido de [53]	52
1.16. Esquema experimental de inyección de armónicos en Galio XXII. Obtenido de [21]	53
1.17. Amplificación del armónico 21 al atravesar la columna de plasma. Obtenido de [21]	54
1.18. Instalación experimental de la inyección de armónicos. Obtenido de [110]	55
1.19. Espectros experimentales en distintas condiciones. a) HHG unicamente b) ASE unicamente c) HHG+ASE sin existir ganancia d) HHG+ASE con amplificación. Obtenido de [110] . .	56
2.1. Estructura de un plasma creado por la interacción de un láser de nanosegundos con un blanco sólido.	64
2.2. Función dieléctrica de un gas de electrones libres.	65
2.3. Diagrama esquemático de la incidencia oblicua en plasmas con un gradiente de densidad. Figura obtenida de [24].	69
2.4. Estimación de $\Phi(\tau)$	71
2.5. Abundancia de iones neonoides y niqueloides para un plasma de estaño en función de la temperatura. Obtenido de [37] . . .	74
2.6. Coeficiente de ganancia por densidad del ión fuente (cm^2) de las transiciones $2p^53p - 2p^53s$ del selenio neonioide, en función de la temperatura electrónica para una densidad electrónica de $n_e = 5 \times 10^{20}cm^{-3}$. Las líneas de puntos se refieren a la transición J=0-J=1 (la de interés para esta tesis) y las continuas a la J=2-J=1. I indica la ionización de capa interna, C excitación colisional y R la recombinación dielectrónica. Figura obtenida de [31].	78
2.7. Refracción y propagación de los rayos que componen el haz de radiación X-UV en un plasma con fuertes gradientes de densidad. Figura obtenida de [12].	80

2.8.	Esquema del transporte de radiación a través de un cilindro de plasma.	82
2.9.	FWHM en función de la distancia en las condiciones dadas en [50] y 36 mÅ de ensanchamiento Doppler. En puntos se dan los valores medidos experimentalmente, en línea discontinua los valores estimados en [50] con 14 mÅ de ensanchamiento colisional y en línea continua los valores predichos con 23.5 mÅ de ensanchamiento colisional, calculados con la aproximación de impacto. Figura obtenida de [107].	90
2.10.	Intensidades en el centro de la línea (A) y ensanchamiento de la línea (B) obtenidas en [50] (línea roja), inyectando fuertemente ($I_{seed} = I_{sat}$) en el mismo plasma (línea azul) y variando la inyección en un plasma con el doble de densidad y la mitad de temperatura electrónica (resto de líneas). La duración estimada del pulso se muestra en B. Figura obtenida de [107].	91
3.1.	Diagrama de flujo del código ARWEN.	97
3.2.	Estructura de la solución del problema de Riemann en el plano x-t.	101
3.3.	Reconstrucción lineal a trozos (en azul) de la función $u(x)$ en tres celdas consecutivas.	103
3.4.	Valor medio de la función en la celda u_i^n y valores extrapolados a la izquierda u_i^L y a la derecha u_i^R	104
3.5.	Mapas 2D de la energía radiativa en el test de Mordant. Figura obtenida de [32].	107
3.6.	Simulación de una onda de choque incidiendo en una burbuja, en la que se han usado seis niveles de refinamiento. En a) se muestra el estado inicial del caso: una onda de choque (región izquierda) incidirá sobre una burbuja (en negro). Obsérvese la distribución de mallas en las zonas con gradientes de densidad. En b) tenemos la burbuja deformada al pasar la onda de choque. Las estructuras resultantes pueden observarse gracias al mallado refinado, mientras que, aguas arriba, la malla vuelve a ser gruesa.	108
3.7.	Perfil espacial transversal de la línea focal del láser en el plano definido por la superficie del blanco. Para $n =$ se tiene un perfil gaussiano y para $n = 10$ uno super-gaussiano. Figura obtenida de [12].	112
3.8.	Esquema básico del modelo 2D de trazado de rayos implementado en ARWEN. La lente se representa por una recta sobre la que se define la distribución espacial y un punto focal. . . .	118

3.9. Códigos binarios atribuidos a cada región en el algoritmo de Cohen-Sutherland . La ventana de visualización se ha marcado en rojo y se le asigna el código 0000.	121
4.1. Esquema de Grotrian simplificado y transiciones obtenidas de $[89, 50]$ para hierro neonoide.	130
4.2. Parámetros de un haz gaussiano.	135
4.3. Haz amplificado en un plasma de 1 mm de ancho, simulado con SHADOX. El eje de simetría se encuentra en $X_1 = 0,0$. El haz amplificado avanza en el sentido de Z creciente. Figura obtenida de [56].	137
5.1. Esquema de las simulaciones y del sistema de coordenadas usado	140
5.2. Perfil espacial transversal de la línea focal del láser en el plano definido por la superficie del blanco. Para $n =$ se tiene un perfil gaussiano y para $n = 10$ uno super-gaussiano.	141
5.3. Mapas de densidad electrónica para $t = 100ps$ después de la llegada del máximo de la impulsión, en función del orden n . El orden aumenta de izquierda a derecha $n = 1, 2, 10$	143
5.4. Comparación de los perfiles y gradientes de densidad electrónica para $n = 1$ (línea de puntos) y $n = 10$ (línea sólida) para $n_e(y) = 5 \times 10^{20} cm^{-3}$. a) Densidad electrónica $n_e(y)$ y b) gradientes de densidad electrónica $\nabla_x n_e(x)$ correspondientes . . .	144
5.5. Mapas de temperatura del plasma para $t = 100ps$ después de la llegada del pico de la impulsión en función del orden n . El orden aumenta de izquierda a derecha $n = 1, 2, 10$	145
5.6. Cortes transversales, según el eje x , de la distribución de la temperatura en la zona de $n_e = 5 \times 10^{20} cm^{-3}$ para $n = 1$ (línea azul) y $n = 10$ (línea roja).	146
5.7. Evolución temporal de la densidad del pre-plasma para diferentes instantes $-200, 0, 200, 400, 600ps$. El origen de tiempos es la llegada del pico de la impulsión láser larga. Se muestran dos perfiles transversales diferentes de línea focal: $n = 1$ y $n = 10$. La escala de colores cambia entre las figuras.	147
5.8. Evolución temporal de la temperatura del pre-plasma para diferentes instantes $-200, 0, 200, 400, 600ps$. el origen de tiempos es la llegada del pico de la impulsión láser larga. Se muestran dos perfiles transversales diferentes de línea focal: $n = 1$ y $n = 10$. La escala de colores cambia entre las figuras.	148

5.9. Comparación de las velocidades laterales v_x en distintos instantes ($-200, 0, 200, 400ps$). El orden es $n = 10$ para las figuras de la izquierda y $n = 1$ para las de la derecha. La velocidad $v_x \approx 0$ está indicada en color rojo, $v_x < 0$ corresponde al amarillo y $v_x > 0$ al azul.	150
5.10. Comparación de las velocidades axiales v_y en distintos instantes ($-200, 0, 200, 400ps$). El orden es $n = 10$ para las figuras de la izquierda y $n = 1$ para las de la derecha. La velocidad $v_y \approx 0$ está indicada en color azul, $v_y < 0$ corresponde al amarillo y $v_y > 0$ al rojo.	151
5.11. Mapas de densidad electrónica para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 300 \mu m$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$	153
5.12. Mapas de temperatura para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 300 \mu m$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$	154
5.13. Mapas de densidad electrónica para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 15 \mu m$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$	155
5.14. Mapas de densidad electrónica para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 15 \mu m$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$	156
5.15. Representación esquemática de los efectos implicados en la evolución del preplasma y fenómenos a los bordes	158
5.16. Mapa de ganancia para un retraso de 200 ps después del pico de la impulsión. A la izquierda el caso super-gaussiano $n = 10$ y a la derecha el caso gaussiano $n = 1$	160
5.17. Mapa de la diferencia de ganancia para un retraso de 200 ps después del pico de la impulsión	161
6.1. Esquema de los tres pulsos láser usados en estas simulaciones. El primer pulso simula el prepulso que crea el plasma. El segundo es el pulso principal que crea el estado de ionización adecuado, y el tercer pulso aumenta la temperatura de los electrones libres. El eje X representa el tiempo y el eje Y la intensidad en escala logarítmica.	164

6.2. Mapas de ganancia para los casos simulados: 20 μm (A), 30 μm (B), 50 μm (C), 75 μm (D), 100 μm (E), 150 μm (F), 200 μm (G) y 1 mm (H). Todas las figuras tienen la misma escala vertical para permitir la comparación. La línea roja indica la posición del blanco. Los láseres inciden desde la parte inferior de las figuras	166
6.3. Mapas 2D de ganancia ampliados para los casos de 20 (izquierda) y 30 μm (derecha) que corresponden a las figuras 6.2.A y 6.2.B	167
6.4. Mapas de temperatura electrónica en color e isocontornos de densidad electrónica para todos los casos simulados: 20 μm (A), 30 μm (B), 50 μm (C), 75 μm (D), 100 μm (E), 150 μm (F), 200 μm (G) y 1 mm (H). En blanco se muestran los valores de densidad electrónica ($\times 10^{19} cm^{-3}$). Los láseres inciden desde la parte inferior de la figura.	169
6.5. Velocidad vertical en $t = 1,5 ns$ para los ocho casos. La línea azul indica la posición inicial del blanco. El plasma se expande hacia abajo.	171
6.6. Velocidades del plasma en la dirección X para $t = 1,5 ns$ para los ocho casos simulados. La escala horizontal es distinta en los casos de 20 μm , 200 μm y 1 mm.	172
6.7. Cortes de densidad electrónica en la dirección Y en el centro del plasma ($X = 0 \mu m$) para los ocho casos estudiados. El plasma se expande de derecha a izquierda. La extensión de la zona de ganancia se indica con flechas.	177
6.8. Ganancia de un plasma creado con un ancho focal de 2 mm. El láser incide desde la parte inferior de la imagen.	182
6.9. Mapa de ganancia para un plasma creado con un ancho láser de 2 mm, pero usando un pulso de bombeo con la mitad de intensidad que en los casos anteriores.	184
6.10. Energía del haz inyectado (en escala logarítmica) y longitud recorrida en el plasma para los distintos plasmas estudiados en esta tesis.	187
6.11. Energía del haz inyectado (en escala logarítmica) y longitud recorrida en el plasma en el caso de 30 μm , comparado con [106].	188
6.12. Energía obtenida en un plasma de 2 mm de ancho, inyectando 100 nJ de armónicos de alto orden directamente. La parte superior corresponde a los tres primeros milímetros de la inferior.	190
6.13. Energía obtenida en un plasma de 2 mm de ancho, inyectando 1 μJ de armónicos de alto orden directamente. La parte superior corresponde a los tres primeros milímetros de la inferior. .	191

6.14. Esquema de amplificación de armónicos de alto orden multi-etapa. El haz de armónicos se inyecta en un pre-amplificador encargado de reducir el ancho de línea del haz a amplificar mientras que el amplificador se encarga de aumentar eficientemente su energía.	192
6.15. Energía obtenida en un plasma de 2 mm de ancho, inyectando $1 \mu J$ de armónicos de alto orden directamente. La parte superior corresponde a los tres primeros milímetros de la inferior. .	193
7.1. Imágenes 3D reconstruidas a partir de los perfiles de la superficie realizados en el <i>Institut d'Optique</i> por A. Jérôme y M.-F. Ravet. Imagen obtenida de [12].	198
7.2. Densidad, velocidad horizontal y densidad electrónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.	200
7.3. Temperatura electrónica e iónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.	201
7.4. Mapa de ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa.	202
7.5. Densidad, velocidad horizontal y densidad electrónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. En esta simulación se ha utilizado la subrutina de trazado de rayos para modelar la deposición láser. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.	203
7.6. Temperatura electrónica e iónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.	204
7.7. Mapa de ganancia de un plasma con rugosidades simulado usando subrutinas de trazado de rayos.	205

7.8. Mapas 2D de deposición de energía (derecha) y cortes horizontales de la deposición de energía en la zona de máxima ganancia (el corte está indicado por una línea a trazos) para el caso usando subrutinas de deposición de la energía láser simples (arriba) y usando trazado de rayos (abajo).	205
7.9. Haz amplificado al atravesar un milímetro de plasma. En el caso de la izquierda (A) el plasma se simuló con la subrutina simple de deposición de energía; en el de la derecha (B) se usó la subrutina de trazado de rayos.	206
7.10. $\Delta T/T$ Vs tiempo para tres amplitudes diferentes: 5 % (rojo), 2.5 % (verde) y 1 % (azul)	208
7.11. Densidad, densidad electrónica, velocidad horizontal, velocidad vertical, temperatura iónica e ionización media en el plasma antes de la llegada del pulso corto perturbado.	210
7.12. Mapas bidimensionales en falsos colores de temperatura electrónica y corte horizontal de ésta en la zona de ganancia (señalado mediante la línea a trazos) para distintos momentos temporales: a) 4 ps antes de llegar el máximo del láser, b) 3 ps antes, c) 2 ps antes.	211
7.13. Mapas bidimensionales en falsos colores de temperatura electrónica y corte horizontal de ésta en la zona de ganancia (señalado mediante la línea a trazos) para distintos momentos temporales: a) 1 ps antes de llegar el máximo del láser, b) en el máximo del láser, c) 1 ps después.	212
7.14. Mapas bidimensionales en falsos colores de temperatura electrónica y corte horizontal de ésta en la zona de ganancia (señalado mediante la línea a trazos) para distintos momentos temporales: a) 2 ps después de llegar el máximo del láser, b) 3 ps después, c) 4 ps después.	213

Capítulo 1

Fuentes de radiación X coherente

1.1. Introducción

En la actualidad existe un gran interés en el desarrollo de fuentes de alta brillantez de radiación X blanda coherente debido a la gran cantidad de aplicaciones en diversos campos como son la biología [9, 60, 16], la física [41] o el microprocesado. Diversas fuentes de esta radiación están ya disponibles, como los láseres de electrones libres (FEL), los láseres de rayos X basados en plasmas y los armónicos de alto orden.

La radiación compuesta de fotones con energías en el rango entre 20 eV y 600 eV es conocida como ultravioleta extremo, rayos X blandos o radiación XUV. Esta radiación presenta ciertas propiedades ópticas que la diferencian de la radiación ultravioleta y de los rayos X. La longitud de penetración de la radiación XUV es muy pequeña en la mayoría de los materiales (del orden de $1\mu m$). No hay prácticamente reflexión bajo incidencia normal y la longitud de onda es demasiado grande para usar la reflexión de Bragg en cristales. Solamente gracias al progreso realizado en las últimas décadas, con la ayuda de las fuentes de radiación sincrotrón, se han podido desarrollar sistemas ópticos para radiación XUV.

1.2. Principios de funcionamiento de un láser

Un láser puede considerarse como un sistema amplificador de radiación. No en vano, la palabra *láser* es un acrónimo de *Ligh Amplification by Stimulated Emission of Radiation*. Existe múltiples tipos de láseres, tanto comerciales como en desarrollo, barriendo un amplio rango de energías, longitudes

de onda, intensidades y propiedades ópticas del haz [72]. Sin embargo, en todos ellos existe un medio de ganancia, donde se produce una inversión de población y la amplificación. Este medio amplificador varía según el tipo de láser: puede ser un sólido cristalino como en el primer láser demostrado por Theodore Maiman en 1960, donde el medio amplificador era un cristal de rubí o los más modernos amplificadores de Titanio-Zafiro (Ti:Sa), un gas como los láser de CO_2 o excímeros, un semiconductor e incluso plasmas (que serán tratados con mayor profundidad a lo largo de esta tesis) y *agrupaciones* de electrones.

El principio físico responsable de la amplificación en el medio, la emisión estimulada, fue descrito por primera vez en 1916 por Albert Einstein [23]. Suponiendo una cavidad cerrada a temperatura T en cuyo interior existen fotones, en equilibrio térmico, el número de absorciones por unidad de tiempo y para cada frecuencia ha de ser igual al número de emisiones. Haciendo la suposición adicional de que los átomos de las paredes de la cavidad solo disponen de dos niveles energéticos k, n , la probabilidad de ocupación de estos estados en equilibrio viene dada por la ley de Boltzmann:

$$\frac{P_k}{P_n} = \exp\left(\frac{\epsilon_n - \epsilon_k}{kT}\right) \quad (1.1)$$

La tasa de absorción de fotones de energía $\hbar\omega = \epsilon_n - \epsilon_k$ es proporcional al número N de fotones y a la probabilidad de que el átomo esté en el estado de menor energía:

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{abs} = -B_{kn}NP_k \quad (1.2)$$

siendo B la probabilidad de absorción inducida. La probabilidad de emisión estimulada será proporcional a las mismas cantidades y, por el principio del balance detallado, la constante de proporcionalidad será la misma:

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{estim} = B_{nk}NP_n \quad (1.3)$$

Por último, la emisión espontánea dependerá únicamente de la probabilidad de encontrarse el átomo en el nivel superior de energía:

$$\left(\frac{dN}{dt}\right)_{esp} = A_{nk}P_n \quad (1.4)$$

En el equilibrio se ha de cumplir que

$$B_{kn}NP_k = A_{nk}P_n + B_{nk}NP_n \quad (1.5)$$

1.2. PRINCIPIOS DE FUNCIONAMIENTO DE UN LÁSER

Utilizando la razón de poblaciones es fácil obtener

$$N = \frac{A_{nk}}{B_{kn} \exp(\hbar\omega/kT) - B_{nk}} \quad (1.6)$$

La densidad de energía de los fotones en equilibrio a temperatura T viene dada por la fórmula de Planck:

$$N = \frac{2\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \quad (1.7)$$

Igualando ambas expresiones se obtiene la relación entre los tres coeficientes:

$$B_{nk} = B_{kn} \quad (1.8)$$

$$\frac{B_{kn}}{A_{nk}} = \frac{\pi^2 c^3}{2\hbar\omega^3} = \frac{\lambda^3}{16\pi\hbar} \quad (1.9)$$

Un cálculo semiclásico [75] nos permite calcular el coeficiente B_{kn} que en la aproximación dipolar es:

$$B_{kn} = \frac{4\pi^2}{3\hbar c} \alpha |\mathbf{r}_{kn}|^2 \quad (1.10)$$

Con estos coeficientes fenomenológicos, es posible describir la interacción de la radiación y la materia de una manera de una manera muy simple, pero que nos permitirá comprender los principios básicos de un láser. La intensidad de radiación, al atravesar un medio material, sufre una atenuación proporcional a ella misma, siendo el coeficiente de proporcionalidad α el coeficiente de atenuación:

$$\frac{dI}{dx} = -\alpha I \quad (1.11)$$

La solución de esta ecuación es la bien conocida ley exponencial de atenuación: $I = I_0 \exp -\alpha x$, es decir, la radiación es absorbida por el material. Para que esto sea posible, deben existir en el material niveles energéticos con la misma energía que los fotones absorbidos, para que se produzcan transiciones. Por razones de simplicidad, supondremos el material compuesto por átomos que solo pueden estar en dos niveles: el fundamental N_1 y un único nivel excitado N_2 . La energía de los fotones, por la misma razón de simplicidad, será exactamente $h\nu = E_2 - E_1$. El número de fotones en el campo de radiación N_ν variará al ser absorbidos mediante absorción estimulada y emitidos mediante emisión estimulada.

$$-\dot{N}_\nu = N_1 \rho_\nu B_{12} - N_2 \rho_\nu B_{21} = (N_1 - N_2) \rho_\nu B_{21} \quad (1.12)$$

donde ρ_ν es la densidad de energía de radiación. Teniendo en cuenta que la intensidad se puede escribir como

$$I = N_\nu h\nu \frac{c}{n} \quad (1.13)$$

donde c es la velocidad de la luz en el vacío y n el índice de refracción del medio, derivando tenemos:

$$\frac{dI}{dx} = -\alpha I = h\nu \dot{N}_\nu \quad (1.14)$$

Sustituyendo las definiciones de I y \dot{N}_ν se obtiene un valor para el coeficiente de absorción:

$$g \equiv -\alpha = \frac{h\nu B_{21}}{c} (N_2 - N_1) \quad (1.15)$$

Un cálculo más detallado, teniendo en cuenta el ensanchamiento de la raya y la posible degeneración de los niveles, nos da el valor del coeficiente de ganancia:

$$g(\nu) = \frac{\lambda^2 A_{21}}{8\pi} \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) S(\nu) \quad (1.16)$$

donde g_i es la degeneración del nivel i y $S(\nu)$ es el perfil de la línea. La conclusión más importante a la que se llega con esta fórmula es que, cuando $N_2 > \frac{g_2}{g_1} N_1$, el coeficiente de ganancia g (o lo que es lo mismo $-\alpha$) es positivo: la radiación sufre un aumento exponencial. Sin embargo, un sistema en equilibrio termodinámico nunca tendrá más poblado el nivel superior que el inferior. Así pues, para lograr esta inversión de población, será necesario llevar al sistema fuera del equilibrio termodinámico, mediante un método de bombeo.

Para favorecer el efecto láser, es deseable que la relación entre el coeficiente de emisión estimulada y el de emisión espontánea (ecuación 1.9) sea lo mayor posible. Sin embargo esta relación es proporcional al cubo de la longitud de onda de la radiación y, por tanto disminuye para la radiación ultravioleta extrema y rayos X blandos. Así pues, para obtener láseres de cortas longitudes de onda hay que usar sistemas muy alejados del equilibrio termodinámico local, con una fuerte inversión de población (ecuaciones 1.15 o bien 1.16 por lo que es necesario disponer de una gran potencia de bombeo.

1.3. Generación de radiación X coherente

Como se ha explicado en la sección 1.2, para obtener radiación XUV coherente es necesario crear una inversión de población entre dos niveles

cuya diferencia de energía esté comprendida en el intervalo correspondiente a dicha radiación. Por ejemplo, las energías de las transiciones entre los dos últimos niveles electrónicos de átomos neutros son del orden de magnitud de 100 eV, que corresponde a una longitud de onda de aproximadamente $12\mu m$. Se podría pues intentar crear una inversión de población mediante bombeo óptico de los átomos neutros, usando fuentes de rayos X incoherentes. Sin embargo, el flujo de radiación X necesario para crear la inversión de población es demasiado grande como para hacer viable este mecanismo. Por ello será necesario buscar otros esquemas que permitan obtener una inversión de población entre niveles adecuados.

1.3.1. Láser de Electrones Libres

Como se ha explicado en la sección anterior, al disminuir la longitud de onda de la radiación a amplificar se disminuye el cociente entre emisión estimulada y emisión espontánea, siendo más complejo obtener el efecto láser. Recientemente (abril del 2009), se ha logrado un verdadero láser de radiación X, con una longitud de onda $\lambda = 0,15$ nm en el Láser de Electrones Libres (*Free Electron Laser*; FEL) del SLAC National Accelerator Laboratory: el *Linear Coherent Light Source* LCLS [1]. Otros FEL, operando a mayores longitudes de onda, llevan operando desde hace unos años. El ejemplo más significativo es FLASH [7] (DESY, Hamburgo). Este láser, con una longitud de onda de $\lambda = 32$ nm, de pulsos ultracortos (25 ps FWHM) y relativamente elevado número de fotones por pulso ($\approx 10^{12}$) ha permitido diferentes aplicaciones de la radiación X coherente en diversos campos como la biología [60, 16] o la física atómica [103]. Como ejemplo de estas aplicaciones se comentará brevemente la difracción de pulsos ultra cortos que permitirá obtener imágenes tridimensionales de proteínas con una resolución de decenas de nanómetros.

Cuando una muestra biológica, por ejemplo una proteína, un virus o una célula; es iluminada por un haz enfocado de radiación X proveniente de un FEL, la rápida ionización de la muestra (del orden de femtosegundos) provoca la explosión Coulombiana de la molécula, destruyéndola rápidamente. La dinámica de la explosión Coulombiana ha sido modelada en [60] para una proteína, llegando a la conclusión de que con un pulso de radiación X coherente ultracorto y extremadamente brillante, se podría obtener un esquema de difracción de la muestra antes de que ésta explote y se convierta en un plasma. El primer paso para la demostración de esta técnica fue realizado por Chapman *et al* [16]. Un pulso de 25 fs, $4 \times 10^{13} W/cm^2$ conteniendo 10^{12} fotones de $\lambda = 32nm$ se usó para obtener el esquema de difracción de estructuras nanométricas no periódicas, antes de que la muestra quedara destruída

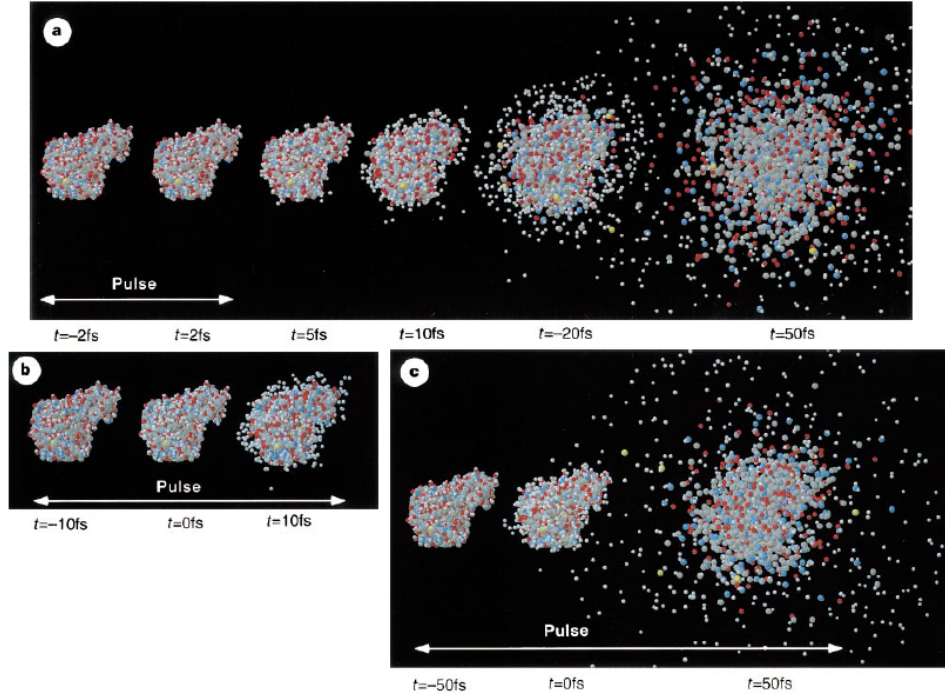


Figura 1.1: Explosión de la enzima T4 lisozima (blanco H, gris C, azul N, rojo O, amarillo S) inducida por el daño producido por la radiación. Las posiciones atómicas no varían mientras el pulso actúa cuando este es corto (2 fs, figura a), mientras que cuando éste es más largo se inicia la explosión antes de acabar el pulso, perdiendo resolución. Obtenido de [60]

al alcanzar temperaturas de $\approx 60,000K$.

El esquema del experimento se muestra en la figura 1.2. El haz incide desde la izquierda y ha sido enfocado en un punto de $20\mu m$ en la muestra. Ésta es una membrana de 20 nm de anchura con un dibujo perforado, mostrado en la subfigura. La barra negra indica $1\mu m$. El haz directo atraviesa la muestra y escapa por un agujero en el centro del espejo multicapa. Este espejo refleja la radiación X difractada por la muestra para producir una imagen del campo lejano en el detector. Esto facilita la reconstrucción de la imagen ya que el patrón de difracción obtenido en el detector es la transformada de Fourier de la onda que sale de la muestra [34].

En la figura 1.3 se muestran los diagramas de difracción obtenidos al iluminar la muestra 1.3.a y 20 segundos más tarde 1.3.b, realizada para observar los daños producidos en ella. El patrón de difracción mostrado en la figura 1.3.a se compone de un moteado y una línea horizontal y otra vertical bien definidas. Estas líneas son el patrón de difracción del marco cuadrado

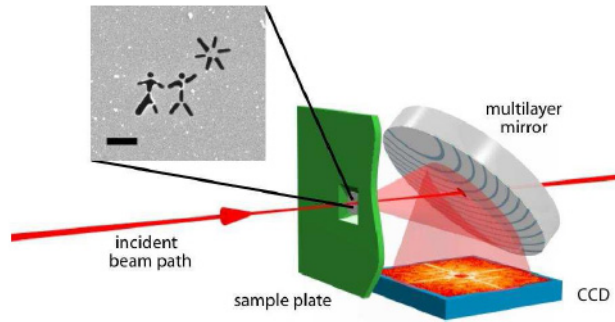


Figura 1.2: Diagrama del experimento de difracción. Obtenido de [16]

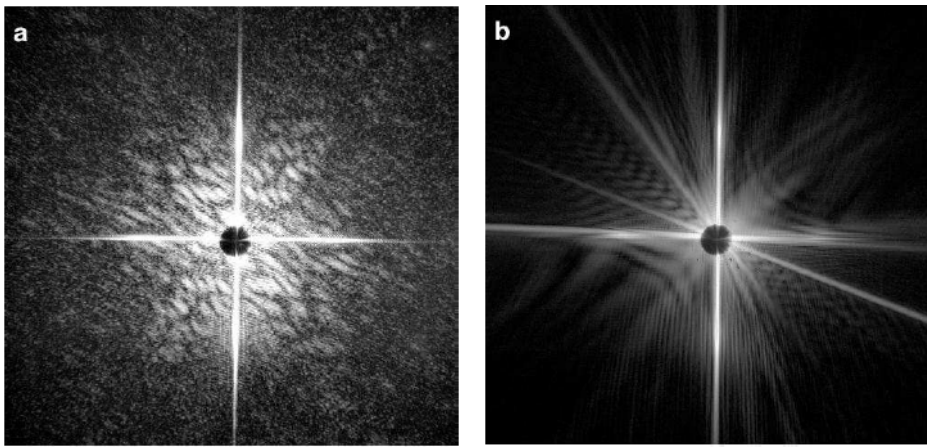


Figura 1.3: Patrones de difracción de la muestra virgen (a) y de la muestra dañada (b), realizado 20 segundos después de la primera imagen. Obtenido de [16]

de la ventana que sujeta a la membrana donde se ha tallado la muestra. El moteado es el patrón de difracción de la muestra. La figura 1.3.b presenta también las dos líneas resultantes de la difracción por la ventana pero el moteado ha desaparecido completamente, demostrando que la muestra ha sido destruída.

Las figuras 1.4.c y 1.4.d muestran la imagen reconstruída a partir del patrón de difracción mostrado en la figura 1.3.a. Se observa claramente que la imagen reconstruída no presenta ninguna evidencia de daño por el pulso láser. El tamaño de los píxeles en la reconstrucción es de 62 nm, correspondiente a la resolución del método experimental. La imagen obtenida muestra claramente los bordes de la ventana (figura 1.3.d), la figura tallada en la membrana y partículas de suciedad que había en la muestra.

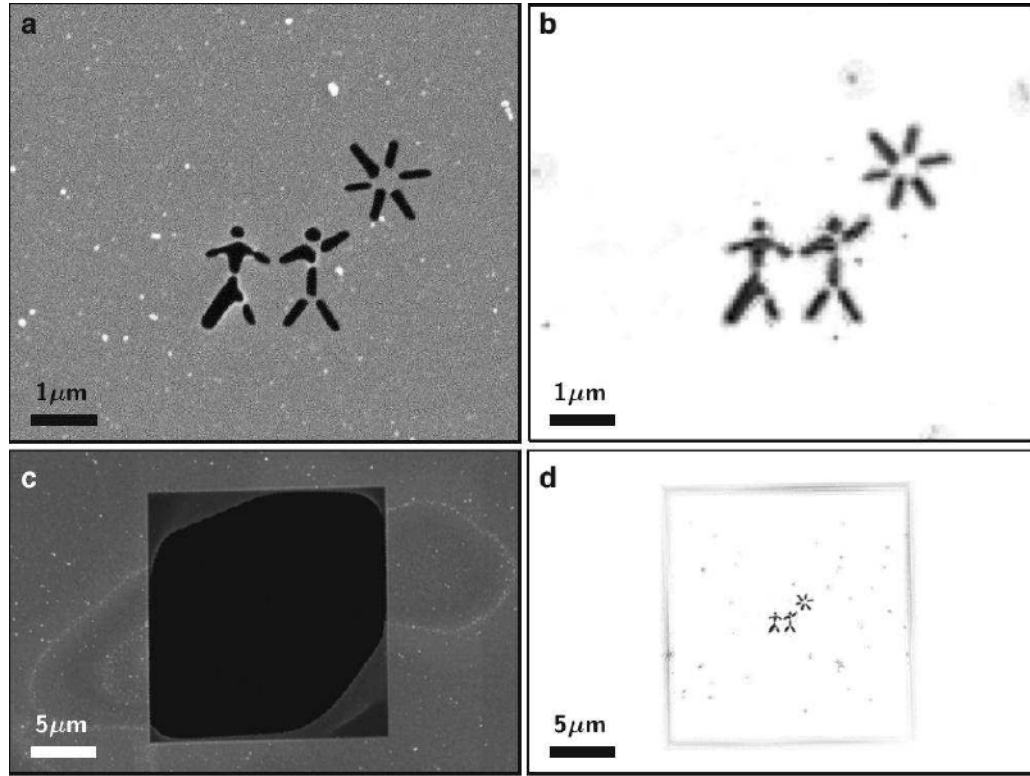


Figura 1.4: Imágenes de la muestra antes de irradiarla (a) y después (c) obtenidas mediante microscopía electrónica (SEM) e imagen reconstruida a partir del patrón de difracción (b) y (d) usando el algoritmo Shrinkwrap. Obtenido de [16]

Esta técnica se ha podido llevar a cabo ya que FLASH permite obtener pulsos ultracortos (decenas de femtosegundos) con un buen frente de ondas que permita la focalización del haz y una energía relativamente alta (decenas de microJulios). El número de fotones por pulso (o la energía del haz) es un parámetro fundamental para las aplicaciones, ya que, como se ha explicado, es necesario un gran número de fotones para obtener un patrón de difracción de calidad en un solo disparo, ya que la muestra queda destruida. Un objetivo realizable para aplicaciones futuras sería obtener un haz de $100\mu\text{J}$, de 100 fs o menos y focalizable. Sin embargo, aumentar la energía del haz en un FEL implica aumentar el tamaño del acelerador de electrones, con el costo que eso conlleva. Es por esto que, a pesar de las excelentes propiedades de estos láseres, es necesario explorar otras fuentes de radiación X coherente. El funcionamiento de los láseres de electrones libres presenta grandes diferencias con el resto de láseres tratados, a pesar de basarse, como todos los láser,

en la amplificación de luz por emisión estimulada de radiación. La principal diferencia se encuentra en las transiciones responsables de esta emisión estimulada: en este caso, la transición se realiza entre dos niveles del continuo, es decir, es una transición libre-libre. Un resultado clásico de la electrodinámica es que las partículas cargadas aceleradas emiten radiación. Esta aceleración se puede lograr de diferentes maneras, siendo una de ellas la introducción de un haz de partículas cargadas en zonas con campos magnéticos que varíen la trayectoria de dichas partículas. El láser de electrones libres se basa en este principio.

Un haz de electrones, moviéndose en la dirección z con velocidad $\mathbf{v} = v_x \mathbf{i} + v_y \mathbf{j} + v_z \mathbf{k}$ con $v_z \approx c$ se inyecta en una zona con un campo magnético de la forma:

$$\mathbf{B} = B \left(\cos \frac{2\pi z}{\lambda_w} \mathbf{i} + \sin \frac{2\pi z}{\lambda_w} \mathbf{j} \right) \quad (1.17)$$

Este campo magnético no ejerce ningún trabajo sobre el haz de electrones, ya que $\mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = 0$, donde \mathbf{F} es la fuerza de Lorentz (perpendicular a \mathbf{v}). Así pues, el campo únicamente cambia la trayectoria de los electrones, haciéndolos oscilar transversalmente a la dirección z . Estas oscilaciones producen radiación de sincrotrón (el electrón sufre aceleraciones) que puede considerarse como una onda plana propagándose en la dirección z . Esta onda puede interactuar con los electrones, intercambiando energía, ya que $e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \neq 0$. Este intercambio de energía es el responsable de la amplificación del haz láser.

Unos cálculos simples nos permitirán relacionar la longitud de onda de la radiación amplificada, con los parámetros del oscilador. De la fuerza de Lorentz $\mathbf{F} = e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ se obtiene:

$$v_x = \frac{Kc}{\gamma} \cos \frac{2\pi z}{\lambda_w} \quad (1.18)$$

$$v_y = \frac{Kc}{\gamma} \sin \frac{2\pi z}{\lambda_w} \quad (1.19)$$

donde $K = \frac{eB\lambda_w}{2\pi m_0 c}$ es el parámetro del oscilador y $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$ el factor relativista. Así mismo, para $v_z \approx c$ y $v_x, v_y \ll c$ tenemos

$$v_z = c \left(1 - \frac{1 + K^2}{\gamma^2} \right)^{\frac{1}{2}} \approx c \left(1 - \frac{1 + K^2}{2\gamma^2} \right) \quad (1.20)$$

También se supone que el campo magnético es lo suficientemente fuerte como para determinar la trayectoria de los electrones, ignorando para su cálculo la onda electromagnética plana a amplificar. Así pues, el campo magnético, al

fijar la trayectoria de los electrones, facilita el intercambio de energía entre éstos y la onda plana.

El campo eléctrico de dicha onda puede escribirse como:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \left[\sin \left(\frac{2\pi z}{\lambda} - \omega t + \phi_0 \right) \mathbf{i} + \cos \left(\frac{2\pi z}{\lambda} - \omega t + \phi_0 \right) \mathbf{j} \right] \quad (1.21)$$

La potencia intercambiada entre los electrones y la onda plana es:

$$\dot{\mathbf{W}} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} = \frac{e\mathbf{E}_0 K \mathbf{c}}{\gamma} \sin \phi \quad (1.22)$$

$$\phi \equiv 2\pi \left(\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\lambda_w} \right) z - \omega t + \phi_0 \quad (1.23)$$

Por consideraciones relativistas $\dot{\mathbf{W}} = \dot{\gamma} \mathbf{m}_0 \mathbf{c}^2$ y

$$\dot{\gamma} = \frac{eE_0 K}{\gamma m_0 c} \sin \phi \quad (1.24)$$

La ecuación 1.24 nos permite calcular la aceleración a la que se ve sometido un electrón al interaccionar con la onda plana, si conocemos el parámetro ϕ . Derivando respecto al tiempo y teniendo en cuenta que la longitud de onda del campo magnético es mucho mayor que la longitud de onda de la onda plana (el oscilador tiene longitudes características de centímetros, mientras que la radiación X es del orden de decenas de nanómetros), se obtiene una ecuación diferencial para ϕ :

$$\dot{\phi} = \frac{2\pi c}{\lambda_w} \left(1 - \frac{\gamma_R^2}{\gamma^2} \right) \quad (1.25)$$

donde $\gamma_R^2 \equiv \frac{\lambda_w}{2\lambda}(1 + K^2)$ es la energía de resonancia de los electrones.

Las ecuaciones 1.24, 1.25 describen a un electrón moviéndose en el campo magnético oscilante junto con la onda plana monocromática. Este electrón puede ganar energía ($\dot{\gamma} > 0$) o cederla a la onda plana ($\dot{\gamma} < 0$) dependiendo del valor de la fase ϕ . Derivando la ecuación 1.20 se obtiene que la velocidad de los electrones depende también de la energía, acelerándose al ganarla y decelerándose al perderla, produciéndose una redistribución de las posiciones de los electrones. Así pues es de esperar que un pulso de electrones tengan una distribución de fases que den lugar a un valor medio nulo de $\sin \phi$ y por tanto, que no haya ni absorción ni emisión de radiación para un haz de electrones. Si la distribución no tiene valor nulo, entonces es posible que los electrones ganen o emitan radiación.

1.3. GENERACIÓN DE RADIACIÓN X COHERENTE

Siguiendo los razonamientos de [58], se puede plantear una ecuación de Vlasov para la función de distribución de los electrones en el espacio de fases $f(\eta, \phi, t)$ donde $\eta = \frac{\gamma - \gamma_R}{\gamma_R} \ll 1$, resultando

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \omega_0 \left(\frac{\Omega}{\omega_0} \right)^2 \sin \phi \frac{\partial f}{\partial \eta} + 2\omega_0 \eta \frac{\partial f}{\partial \phi} = 0 \quad (1.26)$$

Esta ecuación puede resolverse por métodos perturbativos, obteniendo el valor medio del parámetro adimensional de energía $\langle \eta \rangle$. Hasta segundo orden en $\frac{\Omega}{\omega_0}$ su valor medio es el de la distribución estacionaria $\langle \eta \rangle_0$. Al incluir perturbaciones de cuarto orden aparece un término distinto de la distribución estacionaria. Teniendo en cuenta que la energía del electrón es $W = \gamma_R(\eta + 1)mc^2$ se obtiene:

$$\Delta W = \frac{16\pi^2 \sqrt{2} e^2 E_0^2}{mc^2} \lambda^{3/2} \lambda_w^{1/2} K^2 (1 + K^2)^{-3/2} N_w^3 F(\eta_0) G(4\pi\eta_0 N_w) \quad (1.27)$$

donde $F(\eta)$ es el orden 0 del desarrollo perturbativo $f_0(\eta, \phi, t) = F(\eta)$ (es decir, la distribución estacionaria) y $G(x)$ es la solución del orden 4 del desarrollo perturbativo, siendo:

$$G(x) \equiv x^{-3} \left(\cos x - 1 + \frac{x}{2} \sin x \right) \quad (1.28)$$

representada en 1.5.

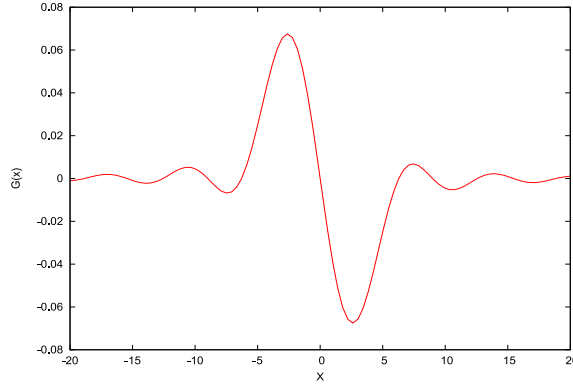


Figura 1.5: Representación gráfica de la función $G(x)$.

Por supuesto, este desarrollo solo es válido para el régimen de señal débil, de tal manera que la onda plana electromagnética no afecta a la trayectoria de los electrones, viniendo ésta dada por el campo magnético exterior.

En la figura 1.5 se observa que cuando los electrones tienen un parámetro $\gamma = \gamma_R$ o lo que es lo mismo $\eta = 0$, no se absorbe ni emite energía. Cuando

$\gamma > \gamma_R$, los electrones emiten energía mientras que cuando $\gamma < \gamma_R$ los electrones la absorben. Así pues, es posible obtener un régimen en el que haya una amplificación neta de la onda electromagnética.

Una ventaja importante de los láseres de electrones libres es que, al no basares en transiciones fijas entre niveles de energía discretos, la longitud de onda del haz resultante puede controlarse de una maera sencilla ya que depende de la energía de resonancia γ_R y ésta a su vez de los parámetros del oscilador λ_w, B_w que pueden variarse fácilmente.

1.3.2. Armónicos de alto orden

Cuando un haz de radiación electromagnética suficientemente intenso interactúa con los electrones ligados de un átomo, es posible que la barrera de potencial que confina a los electrones en el átomo se vea reducida al interactuar con el campo y que los electrones puedan escapar por efecto túnel, quedando el átomo ionizado. Estos electrones, a su vez, pueden colisionar con más átomos, excitándolos y pudiendo crear una inversión de población entre niveles que emitan radiación X coherente.

En la sección 1.4.2 se describirá un método (OFI) para obtener radiación XUV coherente consistente en hacer interaccionar un pulso láser intenso, polarizado circularmente, con átomos en un gas. La emisión laser OFI es un fenómeno colectivo de respuesta del gas a un haz intenso. Cuando el haz está polarizado linealmente y es suficientemente intenso, son los átomos los que responden individualmente de manera no-lineal emitiendo armónicos impares de la radiación incidente (es decir, si la frecuencia del haz incidente es ω se emite radiación de frecuencias $3\omega, 5\omega \dots$). Este efecto es conocido como *High Harmonic Generation* o HHG. Los armónicos así generados pueden separarse mediante redes de difracción obteniendo espectros como el mostrado en la figura 1.6.

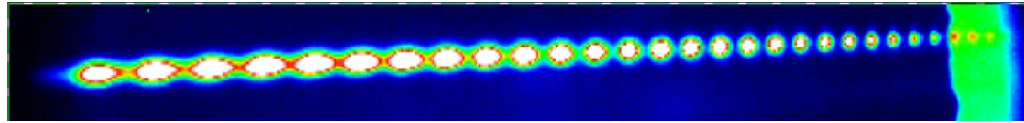


Figura 1.6: Armónicos de alto orden separados espacialmente.

La corta duración (del orden de femtosegundos e incluso attosegundos [19]) de los pulsos de armónicos de alto orden los hacen especialmente indicados para aplicaciones en física atómica. Por ejemplo, en [41] se explica el método de obtención de imágenes tomográficas de los orbitales más externos (*Highest Occupied Molecular Orbitals* HOMOs) a partir de los armónicos generados

al incidir un haz láser de $\lambda = 800nm$, con una duración de 30 fs y una intensidad de $I = 2 \times 10^{14} Wcm^{-2}$ polarizado horizontalmente en un chorro de N_2 en el que se han alineado previamente las moléculas.

Esto es posible ya que la ionización por efecto túnel (necesaria en la generación de armónicos, como se explicará más adelante) en el N_2 ioniza únicamente el estado electrónico superior (HOMO) y que el espectro de armónicos viene dado por la transformada de Fourier de la aceleración del dipolo que emite la radiación de armónicos. Así pues, el espectro de armónicos contiene las componentes de Fourier de la forma de este orbital.

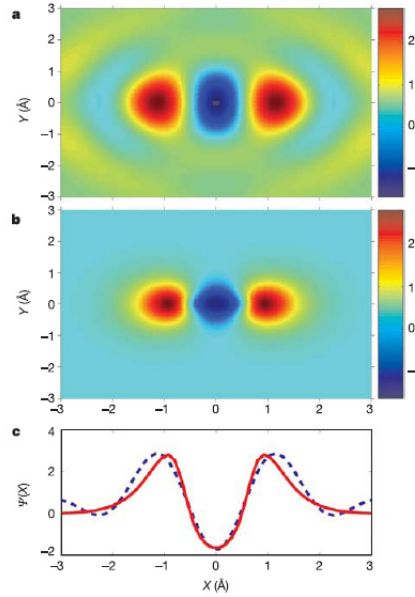


Figura 1.7: Función de onda del HOMO de N_2 . En a) se muestra la reconstrucción de la función de onda a partir del espectro de armónicos. En b) se muestra la forma del orbital obtenida con calculos *ab initio*. En c) se muestra un corte a través del eje internuclear para la función reconstruida (a rayas) y *ab initio* sólida. Imagen obtenida de [41].

La forma del orbital se puede reconstruir a partir del espectro de armónicos medido en diferentes ángulos y realizando transformadas de Fourier. Para mas detalles se puede consultar la sección de métodos de [41].

Esta aplicación es una de las muchas que se pueden lograr en física atómica y molecular gracias a los pulsos ultracortos, del orden de attosegundos, que se pueden obtener con armónicos de alto orden [19]. Sin embargo, la producción de armónicos en el límite relativista, a través de la reflexión de un haz láser femtosegundo en un espejo oscilante formado por la superficie

crítica de un plasma [22] puede abrir las puertas hacia pulsos mucho más cortos, del orden de zeptosegundos [35]. Así pues, los armónicos de alto orden presentan un interés fundamental gracias a la duración ultracorta de los pulsos que se pueden obtener.

En la mayoría de las aplicaciones la energía del haz de radiación X es un parámetro fundamental. En el caso de armónicos de alto orden, ésta puede aumentarse haciendo que la longitud de coherencia sea mucho mayor que la longitud de absorción para armónicos de orden q . Esto se consigue aumentando la longitud de interacción del láser con el gas. Para ello, hay que aumentar la longitud de Rayleigh del haz láser, lo cual conlleva un aumento del diámetro del foco. En [94] se ha usado esta técnica para generar haces de armónicos con energías de hasta $10 \mu\text{J}$ y longitudes de onda que varían entre $73,6\text{nm}$ y $42,6\text{nm}$.

Así mismo existen diferentes métodos para variar la longitud de onda de un armónico determinado controlando las propiedades del haz láser que los crea [80]. Estos valores de energía, indicados anteriormente, unidos a las características intrínsecas de los armónicos (corta duración, polarización, buen frente de onda y la capacidad de sintonizar la frecuencia) hacen de este método una fuente muy interesante de radiación XUV coherente.

Sin embargo, las aplicaciones más interesantes en el campo de la biología o de la física de plasmas, requieren longitudes de onda más cortas ($\leq 4 \text{ nm}$ para la ventana del agua) y la eficiencia en la generación de armónicos cae muy rápidamente al reducir la longitud de onda [94]. Esto provoca que a estas longitudes de onda no se dispongan fotones suficientes para los experimentos que si se pueden realizar con FEL.

La emisión de armónicos de alto orden se puede explicar con el modelo semiclásico de Corkum [18]. Este modelo está dividido en tres etapas: en la primera etapa, el campo electromagnético del láser reduce la barrera de potencial que mantiene ligado al electrón, permitiendo la ionización por efecto túnel. En la segunda etapa, el electrón es acelerado por el láser, recombinándose con el átomo emitiendo radiación en la tercera etapa.

Durante la primera etapa, el átomo se ioniza por efecto túnel. La tasa de ionización, calculada en función del campo eléctrico del láser usando modelos de ionización por efecto túnel viene dada por

$$W_{dc} = \omega_s |C_{n^*l^*}|^2 G_{lm}(4\omega_s \setminus \omega_t)^{2n^*-m-1} \exp(-4\omega_s \setminus 3\omega_t) \quad (1.29)$$

donde

$$\omega_s = E_s^0 \setminus \hbar \quad (1.30)$$

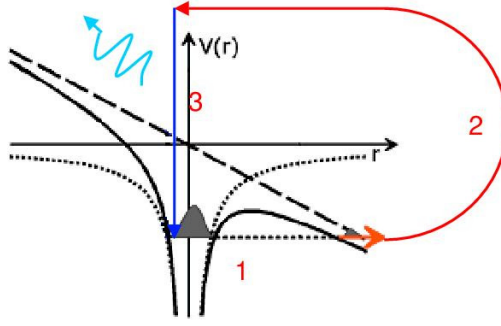


Figura 1.8: Modelo en tres etapas de Corkum

$$\omega_t = e\mathcal{E} \left(2m_e E_s^0 \right) \quad (1.31)$$

$$n^* = \left(E_s^h \setminus E_s^0 \right)^{-1/2} \quad (1.32)$$

$$G_{lm} = \frac{(2l+1)(l+|m|)! (2^{-|m|})}{|m|!(l-|m|)!} \quad (1.33)$$

$$|C_{n^*l^*}|^2 = 2^{2n^*} [n^* \Gamma(n^* + l^* + 1) \Gamma(n^* - l^*)]^{-1} \quad (1.34)$$

En la ecuación 1.29, E_s^0 es el potencial de ionización del átomo, E_s^h el potencial de ionización del hidrógeno, l y m son los números cuánticos azimutal y magnético y \mathcal{E} es la amplitud del campo eléctrico. El número cuántico l^* viene dado por:

$$l^* = \begin{cases} 0 & l \ll n \\ n^* - 1 & \end{cases} \quad (1.35)$$

La probabilidad de ionización $P(t)$ durante el intervalo temporal dt es $P(t) = W_{dc}(\mathcal{E}(t))dt$, donde $\mathcal{E}(t)$ es la magnitud del campo eléctrico $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t) \mathbf{e}_x + \alpha \mathcal{E}_0 \sin(\omega t) \mathbf{e}_y$.

La segunda parte del modelo usa una descripción clásica de la evolución del electrón. Se considera únicamente el campo eléctrico del láser para simplificar, ignorando el campo magnético del láser y el campo eléctrico del ión. Como condiciones iniciales tomamos la posición y velocidad nulas en el momento de la ionización. Después de traspasar la barrera, el movimiento del electrón en el campo viene dado por:

$$\begin{aligned} x &= x_0 [-\cos(\omega t)] + v_{0x}t + x_{0x}, \\ y &= \alpha x_0 [-\sin(\omega t)] + \alpha v_{0y}t + y_{0y}, \end{aligned} \quad (1.36)$$

$$\begin{aligned} v_x &= v_0 \sin(\omega t) + v_{0x}, \\ v_y &= -\alpha v_0 \cos(\omega t) + v_{0y} \end{aligned} \quad (1.37)$$

donde $\alpha = 0$ para polarización lineal y $\alpha = \pm 1$ para polarización circular; $v_0 = q\mathcal{E}_0 / m_e\omega$, $x_0 = q\mathcal{E}_0 / m_e\omega^2$ y $v_{0x}, v_{0y}, x_{0x}, y_{0y}$ se calculan con las condiciones iniciales. La ecuación 1.37 indica que, para polarización circular, el electrón nunca vuelve a las proximidades del ión. Las ecuaciones 1.29 y 1.36 permiten deducir que la mitad de los electrones resultantes de la ionización por la radiación linealmente polarizada pasan por la posición del ión ($x = 0$) una vez durante el primer periodo después de la ionización. El resto de los electrones nunca pasan por la posición del ión. Las ecuaciones 1.29 y 1.37 determinan la probabilidad $P(E)$, por unidad de energía y periodo laser de encontrar un electrón pasando en las cercanías del ión con energía E .

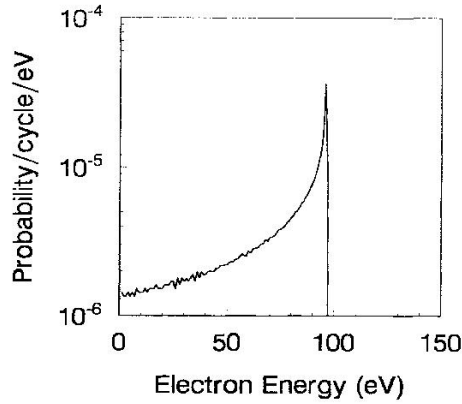


Figura 1.9: Distribución de electrones en el primer encuentro con el ión. Figura sacada de [18].

En la figura 1.9 se representa $P(E)$ calculada para una iluminación uniforme, $I = 5 \times 10^4 \text{ W/cm}^2$, $\lambda = 800 \text{ nm}$ sobre helio. La velocidad máxima y la más probable de un electrón cerca del núcleo corresponde a una energía cinética de $3,17U_p$ (U_p es el potencial ponderomotriz), siendo éste el origen físico de la ley $3,2U_p + E_s^0$ para el corte abrupto observado en la generación de armónicos de orden elevado. Un electrón que escapa del átomo en $\omega t \approx 17^\circ, 197^\circ$, etc, llegará al ión con esa velocidad y, por tanto, hay que tener en cuenta la interacción entre el ión y este electrón, que es la tercera etapa del modelo.

Asumiendo que el estado fundamental no se ha vaciado apreciablemente, esta interacción tiene como consecuencia la emisión de radiación en armónicos de la frecuencia del láser.

La emisión puede calcularse a partir del valor esperado del operador dipolo eléctrico $\langle \psi | er | \psi \rangle$. Si se asume que $\psi = \psi_g + \psi_c$ donde ψ_g es la

1.3. GENERACIÓN DE RADIACIÓN X COHERENTE

función de onda del estado fundamental y ψ_c es la función de onda del continuo, entonces el momento dipolar puede escribirse como $\langle \psi | er | \psi \rangle = \langle \psi_g | er | \psi_c \rangle + \langle \psi_c | er | \psi_g \rangle + c.c.$ Usando la función de onda del estado fundamental del hidrógeno, $\langle \psi_g | er | \psi_c \rangle + c.c.$ son los términos que dominan la emisión de armónicos de alto orden. La función de onda del continuo se construye usando el principio de correspondencia. Como la radiación de una frecuencia armónica dada (E_h/\hbar) debe venir de electrones con energía $E_h - \hbar\omega < E < E_h + \hbar\omega$, se puede escribir la función de onda cerca del origen como:

$$\psi_c(x \approx 0, t) = \sum_h A_p(x \approx 0, t) \exp[ip_h(x \approx 0, t)x/\hbar] \cdot \quad (1.38)$$

$$\cdot \exp\left[-i\left\{p_h(x \approx 0, t)^2/(2m_e + E_s^0)t/\hbar\right\}\right] \quad (1.39)$$

donde el sumatorio es sobre todos los armónicos y $p_h(x \approx 0, t)$ es el momento del electrón para un armónico dado. Un electrón originado en el intervalo $\omega t < 17^\circ$ puede tener la misma energía al pasar por las cercanías del ión que un electrón generado en el intervalo $\omega t > 17^\circ$. Estas contribuciones son sumadas incoherentemente. Para calcular el parametro de normalización A_p , la extensión transversal r de la función de ondas del electrón se asumió lineal en el tiempo con una magnitud de $\sim 1,5 \text{ \AA/fs}$. Como extensión de la función de onda en la dirección de propagación se toma la velocidad del electrón $[p(x \approx 0)/m_e]$ multiplicada por el intervalo temporal δt entre los tiempos cuando los electrones de energía $E_h - \hbar\omega$ y $E_h + \hbar\omega$ pasan cerca del nucleo. La condición de normalización es

$$\int A_p^2 d^3x = \frac{\int_{E_h - \hbar\omega}^{E_h + \hbar\omega} P(E) dE}{V} \quad (1.40)$$

donde $V = \pi r^2 p \delta t / m_e$. Una vez calculado el momento dipolar, se puede calcular el espectro de armónicos emitidos.

Debido a la simplicidad de este modelo, se pueden explicar varias propiedades de los armónicos generados. El corte abrupto a altas frecuencias de la radiación de los armónicos depende de la energía ponderomotriz, ya que la energía máxima de los electrones depende de ésta. Con la asunción de que el estado fundamental no se ha vaciado apreciablemente, la fuerza del momento dipolar inducido para un armónico en particular depende de la probabilidad de que un electrón en un rango de velocidades pase cerca del ión, y por tanto depende de la tasa de ionización. El momento dipolar depende también de la extensión transversal de la función de onda.

1.3.3. Láseres X basados en plasmas

Las transiciones entre los niveles ópticos de átomos varias veces ionizados emiten también en el rango de radiación XUV. Estos niveles *ópticos* son niveles vacíos por encima del estado fundamental, con energías en el rango del espectro visible o ultravioleta cercano cuando el átomo no está ionizado. Extrayendo los electrones externos del átomo, se produce un ión multicargado y las energías de los niveles *ópticos* se desplazan hacia el ultravioleta extremo. Por ejemplo, un átomo de hierro al que se le han quitado 16 electrones (Fe^{16+}) tiene el mismo número de electrones ligados que el Neón. El espectro óptico de ambos átomos es parecido, salvo que el espectro del ión Fe^{16+} está desplazado hacia energías más altas debido a la carga del ión. Así pues, diferentes iones multicargados pueden convertirse en una fuente de radiación X coherente. Estos iones se encuentran generalmente formando plasmas. Los electrones extraídos y los iones forman dos *fluidos* que interaccionan entre si mediante colisiones que excitan a los iones, lo que da lugar a un espectro de emisión continuo con diferentes líneas de emisión superpuestas.

La inversión de población entre los niveles *ópticos* de los iones se puede lograr, ya sea aprovechando la recombinación que tiene lugar al enfriarse el plasma rápidamente al expandirse, poblándose los niveles superiores, ya sea utilizando las colisiones entre los electrones libres y los iones para excitar a estos últimos a niveles superiores. Las dificultades que aparecían en el caso del bombeo de iones neutros desaparecen aquí y ya no es necesario usar radiación X para bombear, sino que se puede usar radiación de otras longitudes de onda para las que se disponga dispositivos ópticos y energía adecuados, como pueden ser láseres infrarrojos.

Esquema de recombinación

El esquema de recombinación consiste en crear un plasma con pulsos largos ($\tau > 100ps$), formado por iones hidrogenoides [92] y litiumoides [44] (que son las dos secuencias isoelectrónicas más usadas) o incluso sodiumoides [112]. Los electrones libres son calentados mediante Bremstrahlung inverso, absorbiendo la energía del láser. Estos electrones colisionan con los iones, continuando el proceso de ionización, hasta un máximo dependiente de la temperatura electrónica. Si se alcanza una densidad electrónica suficiente, los mecanismos de ionización por impacto electrónico y recombinación de tres cuerpos (mecanismos en los que están envueltos un ión y dos electrones) se convierten en los mecanismos dominantes en el plasma. Cuando la temperatura se reduce debido a la rápida expansión del plasma y a las pérdidas radiativas, la recombinación por tres cuerpos favorece la ocupación de los

niveles que están justo por debajo del límite de ionización, mientras que los niveles de menor energía se ocupan mucho más lentamente mediante cascadas desde los niveles superiores y recombinación radiativa. Así, el rápido enfriamiento de un plasma denso puede crear una inversión de población entre niveles de iones.

Las primeras evidencias experimentales de la emisión de radiación XUV coherente fueron dadas por Jaegle y su equipo [43]. El espectro de un plasma de aluminio, producido con láseres, presentaba ciertas anomalías en las líneas de emisión del ión neonioide. En concreto la línea $2p^5 4d \ ^3P_1^0 - 2p^6 \ ^1S_0$ presentaba una gran intensidad mientras que las líneas $^1P_1^0$ y $^3D_1^0$ desaparecían completamente, en total desacuerdo con el espectro usual, obtenido a partir de las probabilidades de transición. Esta anomalía aparecía únicamente en una estrecha región del plasma, cerca del blanco.

Las medidas de la absorción espectral del plasma realizadas en la misma región del espectro usando el método descrito en [11] mostraron que las tasas de absorción eran consistentes con las probabilidades de transición usuales, por lo que fue descartada una posible modificación de dichas probabilidades. Para explicar estos resultados se sugirió que la población del nivel $^3P_1^0$ se veía fuertemente aumentada gracias a la recombinación dielectrónica resultante de la interacción de los iones Al^{4+} con los electrones libres del plasma. Debido a las limitaciones experimentales de la época, hasta varios años después no se pudo confirmar la emisión láser por recombinación en iones litiumoides [44], hidrogenoides [113] y sodiumoides [112].

Este esquema es fácilmente accesible con láseres modestos ya que solo requiere pulsos láser de varios picosegundos e incluso nanosegundos con unas decenas de julios por pulso. Esto hizo que el esquema de recombinación diera lugar a multitud de publicaciones y estudios que contribuyeron de manera importante al desarrollo de los láseres XUV. Sin embargo, no se ha podido alcanzar el régimen de saturación con este esquema, por lo que en la actualidad no es muy eficiente de cara a la producción de radiación XUV coherente para aplicaciones.

Como se ha explicado, el efecto láser se obtiene ionizando en primer lugar los elementos hasta alcanzar la configuración de gas noble (heliumoide o neonioide) o bien el átomo completamente ionizado. Estos iones son muy estables, lo suficiente como para tener un número elevado de ellos en el plasma. La recombinación dielectrónica favorece la ocupación de un nivel superior del ión, que provocará una inversión de población entre dos niveles de energía al decaer hacia el estado fundamental. La transición láser y sus características dependen fuertemente del ión utilizado, por lo que se expondrán brevemente éstos tres casos:

- Iones hidrogenoides. Los iones hidrogenoides son de gran importancia para el estudio de este esquema ya que, al ser el sistema atómico más simple, se conocen con mucha precisión los diferentes parámetros atómicos de interés como tasas de transición, niveles de energía, etc. El proceso de creación de la inversión de población en estos iones es como sigue: la recombinación dielectrónica favorece la ocupación de los niveles cercanos al continuo (banda térmica). Estos niveles se encuentran en equilibrio termodinámico local con el fluido electrónico del plasma. Al enfriarse el plasma, el electrón decae hacia niveles inferiores. La inversión de población entre los niveles 3 y 2 (línea Balmer α) se ve favorecida por el hecho de que la recombinación tiende a poblar el nivel 3 mientras que el nivel 2 se vacía rápidamente debido a sus altas tasas de decaimiento radiativo. La longitud de onda de esta transición (primera de la serie de Balmer, H_α viene dada por $\lambda = 656,3/Z^2$ nm, donde Z es la carga del ión.

La demostración de un láser de recombinación fue publicada en 1985 por Suckewer y su equipo [92], unos meses después de la demostración del primer láser XUV [57]. El plasma se creó con un pulso de 75 ns y 300 J de un láser de CO_2 en un blanco de carbono sólido. La columna de plasma fue confinada con un campo magnético de 9 T y se observó una relación 100:1 entre la emisión estimulada y la espontánea en la línea de $\lambda = 18,2nm$ del carbono hidrogenoide. Una confirmación adicional de la emisión estimulada se obtuvo usando un espejo que reflejaba la radiación X emitida (12 % de reflectividad) obteniendo un incremento en intensidad del 120 %.

En [113] se consiguió medir un coeficiente de ganancia de $12,5 \pm 1,5 cm^{-1}$ en la línea Balmer α del Carbono IV ($\lambda = 18,2nm$), al irradiar fibras de $7 \mu m$ de diámetro y hasta 5 mm de longitud con pulsos láser de 2 ps y 20 J ($I = 6 \times 10^{15} W/cm^{-2}$) de un láser de Neodimio-cristal ($\lambda = 1,053 \mu m$).

- Iones litiumoides. El esquema de niveles de los iones litiumoides se puede observar en la figura 1.10. De nuevo, la recombinación dielectrónica favorece la ocupación de la banda térmica, mientras que el decaimiento debido al enfriamiento favorece la inversión de población entre el nivel 3 y los niveles 4 y 5. La emisión estimulada en aluminio litiumoide fue conseguida por Jaegle y su equipo [44]. Ciertas características hacen de los iones litiumoides una fuente interesante de radiación XUV: La fuente de la inversión de población son los iones heliumoides, muy abundantes en un rango elevado de densidad y temperatura; estos iones

tienen una línea resonante muy intensa que contribuye al enfriamiento del plasma; el decaimiento radiativo del nivel inferior de la transición es muy fuerte y el potencial de ionización relativo a la energía de la transición es menor que en otros esquemas, requiriendo menor temperatura del plasma y por tanto, menores energías de bombeo.

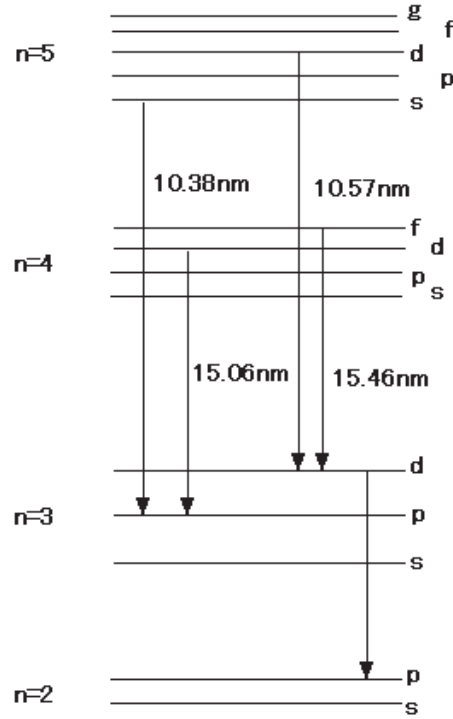


Figura 1.10: Esquema de niveles simplificado del esquema de recombinación en iones litiumoides. Obtenido de [37].

- Iones Sodiooides. En [112] se midió un coeficiente de ganancia de $8,8 \pm 1,4 \text{ cm}^{-1}$ en la transición 5g-4f de $\lambda = 11,1 \text{ nm}$ de los iones sodiooides de cobre, al usar pulsos láser de 2 ps y 20 J ($I = 6 \times 10^{15} \text{ W/cm}^{-2}$) de un láser de Neodimio-cristal ($\lambda = 1,053 \mu\text{m}$).

Excitación colisional

En un plasma en equilibrio, los iones con capas electrónicas completas son relativamente estables, pudiendo encontrarse en abundancia en el plasma. Estos iones tienen 2 electrones (heliumoides), 10 electrones (neonoides), 28 electrones (niqueloides) o bien 46 electrones (paladiumoides). El esquema de excitación colisional consigue la inversión de población mediante el

bombeo por colisiones entre los electrones libres del plasma y estos iones multicargados. En la figura 1.11 se muestra la abundancia de iones al variar la temperatura. En ella se aprecia claramente la relativa abundancia y estabilidad, si se compara con el resto de iones, de los iones neonoides y niqueloides.

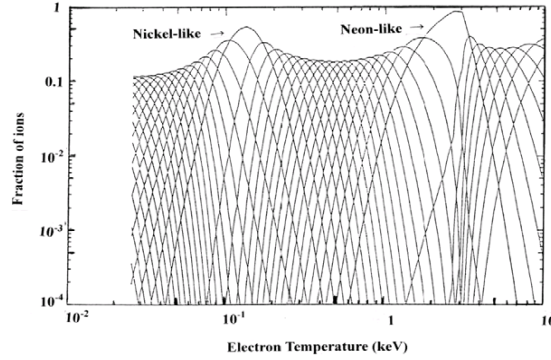


Figura 1.11: Abundancia de iones neonoides y niqueloides para un plasma de estaño en función de la temperatura. Obtenido de [37]

Como se ha explicado, los electrones libres del plasma colisionan con los iones, excitando los electrones del nivel fundamental del ión a estados excitados. Así se puede conseguir una inversión de población cuando alguno de estos estados excitados tiene transiciones prohibidas al nivel fundamental. La tasa de excitación colisional es proporcional a la densidad electrónica y a la temperatura, por lo que en este esquema son necesarios plasmas densos y calientes, que se producen en los laboratorios mediante láseres o bien descargas eléctricas.

Las bases del esquema de excitación colisional se propusieron en la tesis doctoral de P. L. Hagelstein [38], llevando a la demostración del primer láser XUV en 1985 [86, 57]. A partir de ése momento, se ha demostrado emisión láser saturada en multitud de elementos y a diferentes grados de ionización (ver, por ejemplo, [37, 42]). Aquí se describirán los trabajos pioneros en las tres familias de iones fundamentales: neonoides, niqueloides y paladiumoides.

- Iones neonoides. La primera demostración de un láser XUV colisional y por ende, el primer láser XUV tuvo lugar en 1985 [86, 57]. Una lámina de selenio fue iluminada en la instalación láser Novette del LLNL (pensada para la investigación de Fusión por Confinamiento Inercial) con pulsos de 450 ps e intensidades de $5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$ ($\lambda = 0,532 \mu\text{m}$). Ganancias de $5,5 \pm 1,0 \text{ cm}^{-1}$ y $g \cdot l \approx 6,5$ (lejos de saturación pero

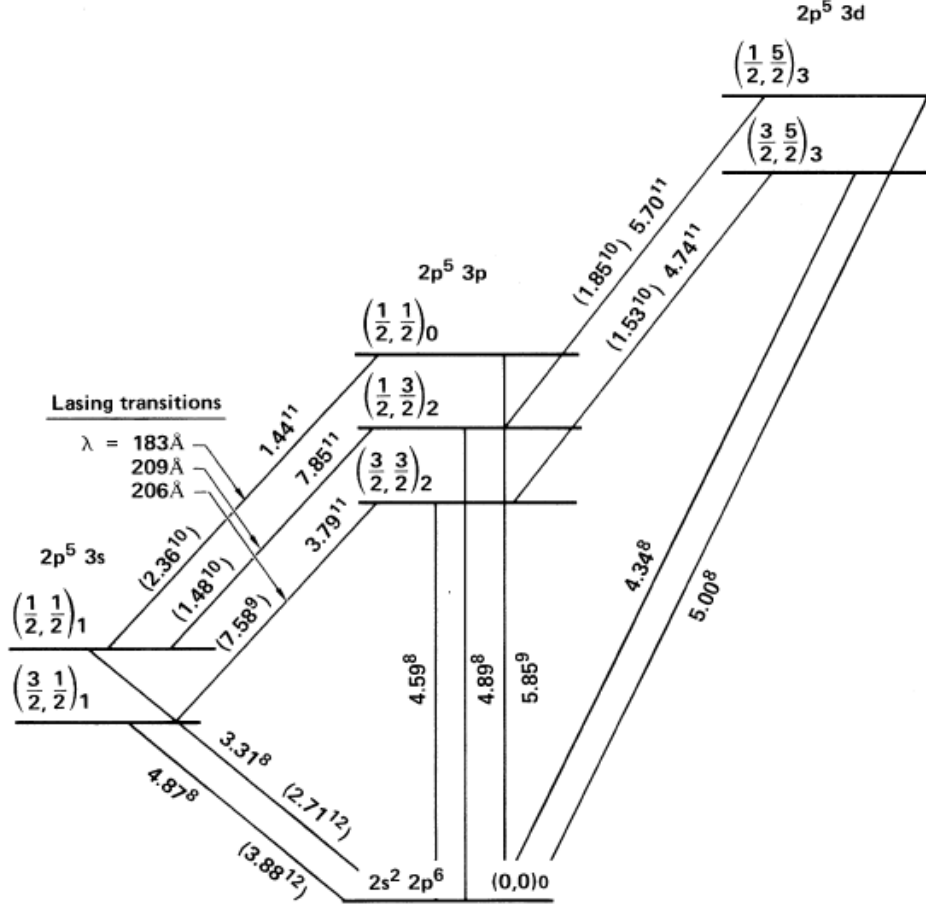


Figura 1.12: Esquema de Grotrian del Selenio neonioide. En él se muestran las tasas de excitación colisional y de emisión espontánea (entre paréntesis) para un plasma de $n_e = 5 \times 10^{20}$ y $T_e = 1 \text{ keV}$. Obtenido de [86]

con fuerte amplificación) fueron medidos para las líneas de emisión $J = 2 \rightarrow 1$ a $\lambda = 20,63 \text{ nm}$ y $\lambda = 20,96 \text{ nm}$ del selenio neonioide. En la tabla 1.1 se muestran las ganancias predichas teóricamente y las medidas experimentalmente para las tres líneas principales del Selenio neonioide. Es interesante notar que, a pesar del muy buen acuerdo en las dos líneas $J = 2 \rightarrow 1$, la línea de emisión $(2p_{\frac{1}{2}} 3p_{\frac{1}{2}})_{J=0} \rightarrow (2p_{\frac{1}{2}} 3s)_{J=1}$ con $\lambda = 18,24 \text{ nm}$ no se observó a pesar de que, teóricamente, ésta debería ser la más intensa. Esta anomalía de la línea $J = 1 \rightarrow 0$ continuó inexplicada durante años a pesar de los esfuerzos realizados en su investigación. El primer paso hacia su clarificación llegó al observar que esta discrepancia era mucho menor al usar blancos más gruesos en

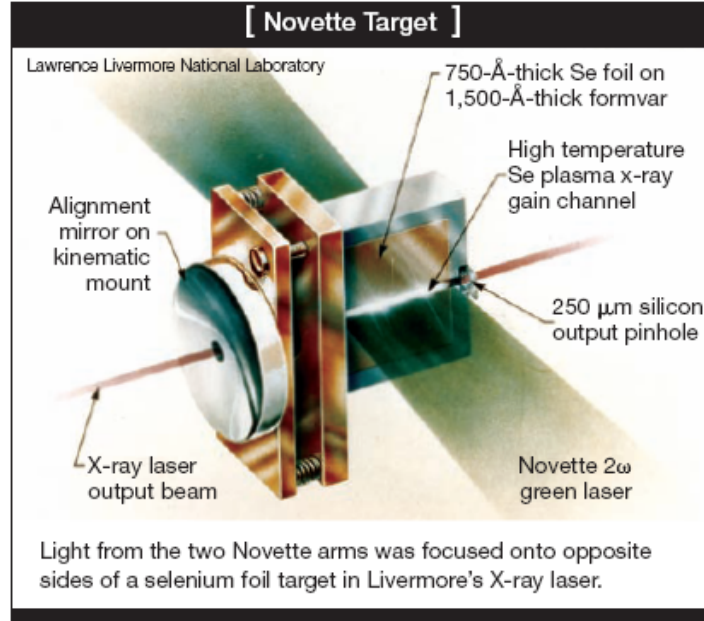


Figura 1.13: Blanco usado en la demostración del laser colisional de Selenio neonioide, usando el láser Novette del LLNL. Obtenido de [40].

Cuadro 1.1: Ganancias predichas y observadas en las tres líneas principales de emisión del Selenio neonioide [40].

Transición	λ (nm)	g_0 predicha (cm^{-1})	g_0 observada (cm^{-1})
$J = 2 \rightarrow 1$	20.96	≈ 4	5.5
$J = 2 \rightarrow 1$	20.63	≈ 4	5.5
$J = 1 \rightarrow 0$	18.24	≈ 10	< 1

lugar de láminas. Finalmente, el uso de prepulsos permitió obtener los valores esperados de ganancia. La línea $J = 1 \rightarrow 0$ no se observaba debido a la refracción que sufría en el interior del plasma. El uso de blancos más gruesos y ,posteriormente ,de un prepulso reducía los gradientes de densidad electrónica y, por tanto, la refracción sufrida por el haz.

En 1992 Carillon *et al* [10] lograron alcanzar la saturación al amplificar la emisión espontánea de un plasma de Germanio neonioide, con una longitud de onda de $\lambda = 23,6nm$ usando un pulso láser de 1 TW. Se usaron dos columnas de plasma para minimizar los efectos de refracción y un espejo para lograr amplificación en dos pasos.

- Iones niqueloides. En [20] se reporta la obtención de radiación láser

1.3. GENERACIÓN DE RADIACIÓN X COHERENTE

XUV en iones niqueloides de Plata, Telurio, Lantano, Cerio, Praseodimio y Neodimio, cubriendo el rango espectral entre 14.3 y 7.9 nm. Para minimizar los efectos de refracción (como se ha explicado con el ejemplo de los iones neonoides, ésta juega un papel fundamental en la transmisión y amplificación del haz) se usó un blanco curvado, iluminado con cuatro haces láser de $\lambda = 1,053\mu\text{m}$ de 100 ps e intensidad igual a $7 \times 10^{13} \text{W}/\text{cm}^2$. Los tres primeros pulsos están separados entre ellos por retrasos de 400 ps mientras que el último tuvo un retraso de 1.6 ns. El efecto láser después del cuarto pulso fue muy superior a los que aparecían antes de él.

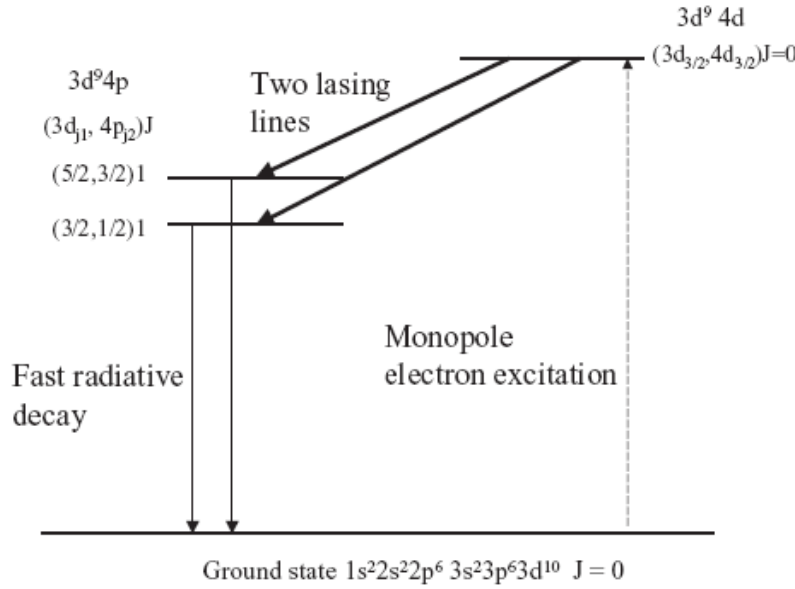


Figura 1.14: Esquema de Grotrian de iones niqueloides. Obtenido de [95].

- Iones paladiumoides. En [53] se comunica la obtención de ganancia (sin llegar a saturación) en un amplificador láser colisional OFI de Xenon paladiumoide (Xe IX). Esto se consiguió enfocando longitudinalmente un haz de 70 mJ y 40 fs de duración en Xe a presiones entre 5 y 12 torr. El haz láser estaba polarizado circularmente (ver sección 1.4.2). Se observó un coeficiente de ganancia de pequeña señal de $g_0 \approx 13 \text{cm}^{-1}$ y un producto ganancia-longitud de $g \cdot l = 11$ en la transición $4d^9 5d^1 S_0 \rightarrow 4d^9 5p^1 P_1$ a $\lambda = 41,81 \text{nm}$ como se muestra en la figura 1.15.

La emisión saturada en iones paladiumoides y amplificadores OFI se consiguió en el 2000, por Sebban *et al* [88], midiendo una ganancia

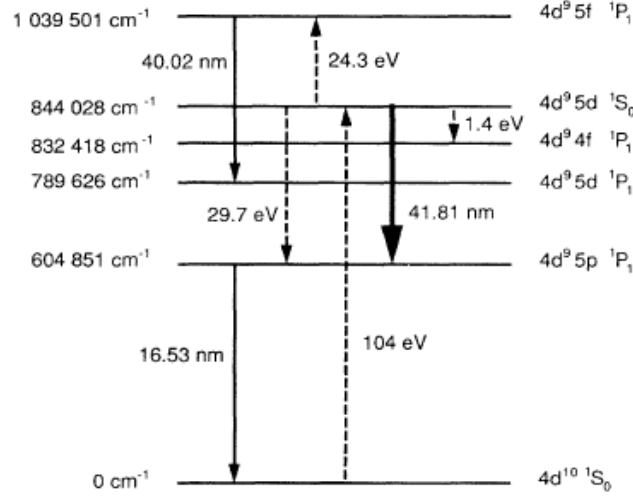


Figura 1.15: Esquema de Grotrian del Xenon paladioide. Obtenido de [53]

de pequeña señal de 67cm^{-1} y una amplificación de $g \cdot l = 15$ en la misma línea del Xenon paladioide, enfocando un haz (Ti:Zafiro) circularmente polarizado de 330 mJ y 35 fs en Xenon a 15 torr.

Inyección de armónicos de alto orden

Los láseres basados en plasmas presentan ciertas ventajas como la posibilidad de obtener energías relativamente elevadas con instalaciones no demasiado costosas. Sin embargo, los esquemas de recombinación y excitación colisional descritos anteriormente se basan en la Amplificación de la Emisión Espontánea, es decir y hablando en términos de electrónica, se amplifica el ruido. Esto presenta ciertos inconvenientes en las propiedades del haz amplificado. En concreto, la coherencia espacial se reduce sensiblemente ya que las diferentes regiones del plasma emitirán espontáneamente de una manera incoherente entre ellas, produciéndose el fenómeno de moteado. Así pues, si en lugar del ruido se amplificara una señal coherente en lugar de múltiples señales incoherentes entre ellas, se mejoraría sustancialmente la calidad del haz. Ésta es la idea que está detrás de la inyección de armónicos de alto orden.

Esta idea ya se intentó llevar a la práctica en las primeras etapas del desarrollo de los láseres de rayos X. En 1995, Ditmire *et al* realizaron un experimento en el que el armónico 21 de un láser de neodimio a 2ω fue inyectado en la región de ganancia de un amplificador de Galio XXII (Galio neonioide) [21]. El esquema del experimento se representa en la figura 1.16.

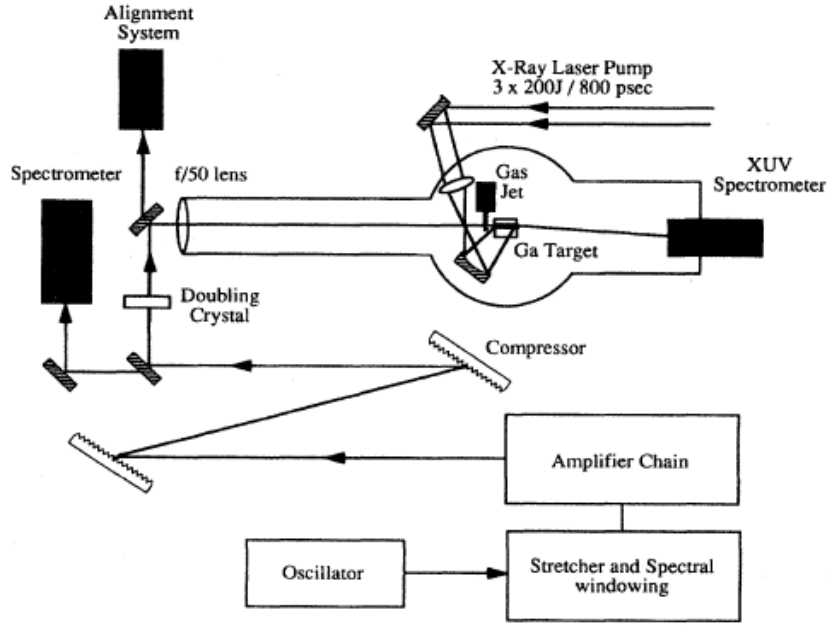


Figura 1.16: Esquema experimental de inyección de armónicos en Galio XXII. Obtenido de [21]

La longitud de onda del armónico 21 se sintonizó con la línea de 25.11 nm $J = 2 - 1$ de la transición láser en el plasma. Se midió una ganancia $g \approx 3$ en este armónico en comparación con los armónicos 19 y 23 que no sufren amplificación. Sin embargo, esta amplificación estaba muy lejos de saturación y no fue lo suficientemente fuerte, como puede observarse en la figura 1.17. Los problemas de acoplamiento espacial, es decir, la pérdida de energía debido a que el área de la zona de ganancia ($\approx 80\mu m$ de diámetro en el experimento) es menor que el área del haz de armónicos enfocado ($\approx 300\mu m$) y espectral, es decir, la pérdida de energía debido a que el plasma solo amplifica una banda muy estrecha alrededor de la línea de emisión, típicamente $\Delta\lambda/\lambda \approx 10^{-4}$ (en el experimento $\Delta\lambda \approx 0,005nm$) mientras que el ancho espectral del haz de armónicos es mayor ($\Delta\lambda \approx 0,01nm$ en el experimento). Estos dos efectos combinados reducen sensiblemente la amplificación resultante del haz. La refracción del haz también jugó un papel importante en la reducción del nivel de amplificación.

El primer gran avance en la inyección de armónicos en plasmas amplificadores se dio en 2004. En este año, P. Zeitoun *et al* [110] demostraron la amplificación del armónico 25 del láser infrarrojo al enfocarlo a alta intensidad en un plasma amplificador OFI (ver sección 1.4.2) de Kriptón niqueloide.

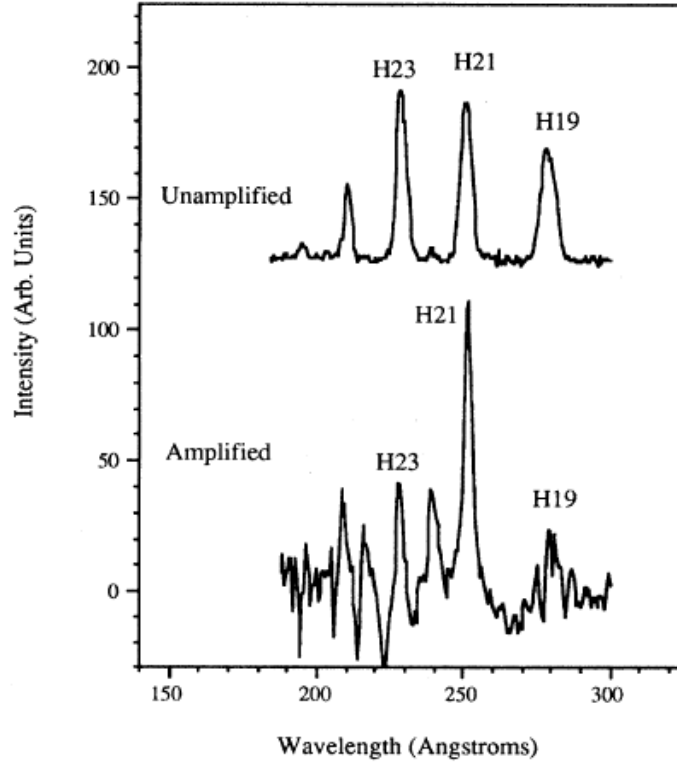


Figura 1.17: Amplificación del armónico 21 al atravesar la columna de plasma. Obtenido de [21]

La alta intensidad de la semilla a inyectar permitió alcanzar rápidamente el nivel de amplificación de energía, mientras que la utilización de un blanco gaseoso para la creación del amplificador redujo los problemas relacionados con la refracción del haz a amplificar. En la figura 1.18 se muestra la instalación experimental usada. Se midió un coeficiente de ganancia de pequeña señal de $g_0 \approx 80 \text{ cm}^{-1}$, alcanzando el régimen de saturación por encima de longitudes del plasma amplificador de 1.7 mm. En la figura 1.19 se muestran los diferentes espectros medidos en distintas condiciones. En a) se muestra el espectro de armónicos generados, mientras que en b) se muestra la emisión ASE del plasma amplificador. Se observa tanto la superposición de la línea de emisión con el armónico 25 como el mayor ancho de banda del armónico comparado con la emisión ASE. En c) se muestra el resultado de inyectar el haz de armónicos en el amplificador en un momento en el que no existe ganancia y, por tanto, amplificación. Por último en d) se observa el espectro resultante de inyectar el haz de armónicos en el momento en el que se ha creado la ganancia en el plasma. En este caso el haz de armónicos amplifi-

1.3. GENERACIÓN DE RADIACIÓN X COHERENTE

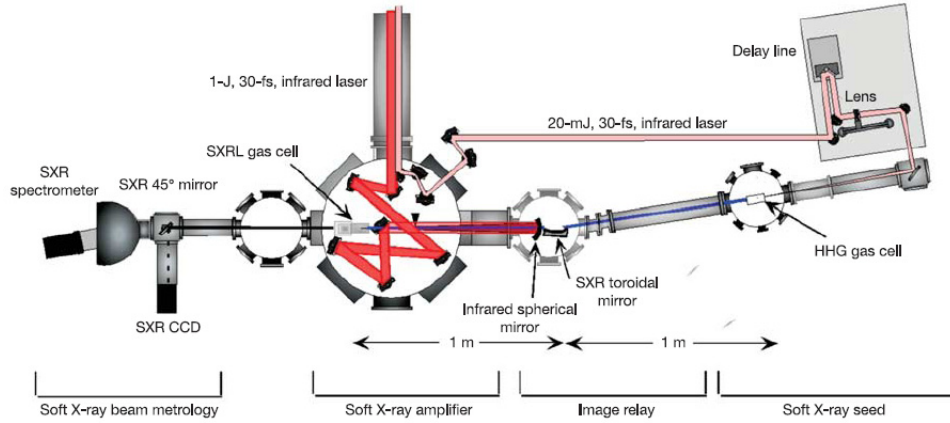


Figura 1.18: Instalación experimental de la inyección de armónicos. Obtenido de [110]

cado domina el espectro. La importancia de este experimento se puede ver claramente si se compara la figura 1.17 con la figura 1.19. Mientras que en la primera las líneas de los armónicos no amplificadas contribuyen significativamente al espectro, en la segunda únicamente el armónico amplificado es importante.

No sólo en [110] se demostró la viabilidad del esquema de inyección de armónicos de alto orden sino que se pudo caracterizar el haz en términos de su divergencia (ligeramente menor que la de la semilla y mucho menor que la de la emisión ASE: 1 mrad frente a 12 mrad), coherencia (buena) y polarización (la misma que el haz de armónicos) y se pudo estimar que la duración del pulso láser fue de aproximadamente 500 fs, siendo en ese momento el único láser de rayos X blandos con pulsos en el rango de femtosegundos. La energía medida fue de $E \approx 0,7 \mu J$ que, enfocada cerca del límite de difracción y con pulsos de 500 fs da lugar a una intensidad de $I = 1,5 \times 10^{16} W/cm^2$.

Los siguientes pasos a seguir, sugeridos también en [110], consistían modificar el plasma amplificador, aumentando su longitud y densidad, mejorar el acoplamiento espacial entre la zona de ganancia y la semilla de armónicos e inyectar a una mayor intensidad para reducir al mínimo la contribución del ASE a la energía total. Las posibilidades de este método permitían sugerir la posibilidad de obtener un láser de rayos X en la ventana del agua (2.2 - 4.4 nm), energías alrededor de 0.18 mJ e intensidades cercanas a $10^{20} W/cm^2$, siendo éste uno de los métodos más prometedores para obtener láseres de rayos X blandos.

Los siguientes avances fueron realizados siguiendo estos pasos, en concreto cambiando el método de creación del plasma amplificador. En [105, 39]

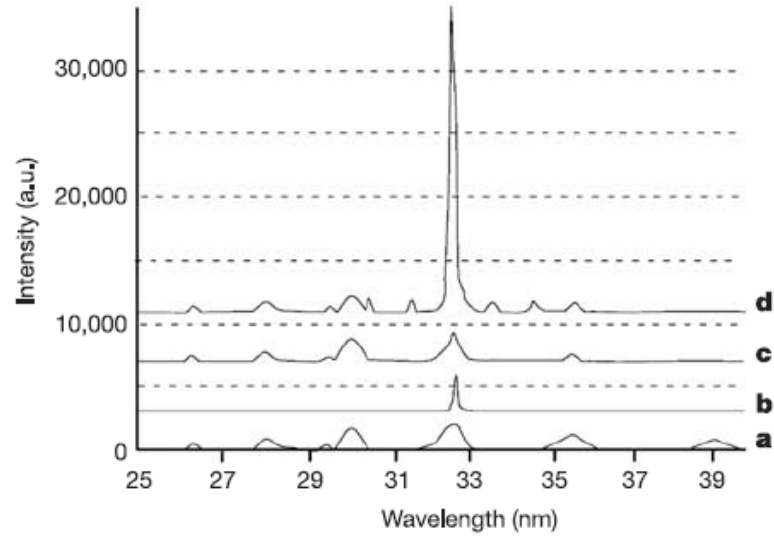


Figura 1.19: Espectros experimentales en distintas condiciones. a) HHG únicamente b) ASE únicamente c) HHG+ASE sin existir ganancia d) HHG+ASE con amplificación. Obtenido de [110]

se usaron blancos sólidos, alcanzando el régimen de saturación en la línea de 32.6 nm de Titanio neonoide en [105]. Las longitudes de onda del haz amplificado se redujeron aún más en [106], amplificando las líneas de 18.9 nm y 13.9 nm de Molibdeno y Plata níqueloides. Es en esta última referencia ([106]) donde se caracteriza el pulso láser, confirmando los resultados de [110] respecto a la divergencia del haz, polarización y coherencia. Sin embargo, la energía medida fue de $E \approx 75 \text{ nJ}$, muy inferior a los $0.7 \mu\text{J}$ de [110]. Esto es un resultado sorprendente ya que, al ser mayor la densidad del plasma creado a partir de blancos sólidos, debería almacenarse en éstos más energía y por tanto, la energía extraída debería ser mayor. En capítulos posteriores se estudiará numéricamente este experimento y se dará una explicación de este fenómeno, sugiriendo varias posibilidades para obtener energías del orden de miliJulios.

1.4. Métodos de creación del plasma

En esta tesis se estudiarán los láseres de rayos X basados en plasmas, con miras a su optimización para inyectar armónicos de alto orden. En la sección anterior se han explicado las diferentes maneras de obtener una amplificación neta de radiación XUV en plasmas de diferente grado de ionización. En esta

sección se estudiarán los diferentes métodos utilizados en la creación e ionización del plasma: descarga eléctrica, *Optical Field Ionization* OFI y blanco sólido. Al igual que los esquemas de la sección anterior, el uso de uno u otro método para crear el plasma dará lugar a láseres de rayos X de diferentes características.

1.4.1. Descarga eléctrica

La excitación de plasmas calientes en capilares a través de descargas eléctricas muy rápidas fue propuesta por J. J. Rocca [82]. El esquema propuesto consiste en una descarga eléctrica en el vacío producido en un tubo capilar de polietileno de 2 cm de longitud y $100\mu m$ de diámetro. El plasma de carbono hidrogenoide es producido al arrancar átomos de la pared del capilar y calentarlos hasta ionizarlos mediante la corriente eléctrica. El rápido enfriamiento del plasma en los instantes finales del pulso provoca la recombinación, creando la inversión de población. Ganancias de $g_0 = 5cm^{-1}$ fueron predichas en la línea de $\lambda = 18,2nm$ del C VI.

La sustitución del vacío por un gas permite desacoplar el plasma de la pared del capilar. El efecto de estricción debido a los campos magnéticos autogenerados incrementa la densidad electrónica y reduce las pérdidas de energía hacia la pared a través de conducción electrónica. Mediante esta técnica se demostró la emisión XUV del Argon neonioide en la línea $\lambda = 46,9nm$ [84, 85] y Azufre neonioide [97]. Se midieron ganancias de pequeña señal del orden de $g_0 \approx 0,6cm^{-1}$, menores que en los láseres XUV basados en láseres infrarrojos, pero compensado con la mayor longitud del plasma (del orden de 12 cm), obteniendo amplificaciones de $g_0 \cdot l = 7,2$.

Usando un espejo de Iridio se diseñó un amplificador de doble paso (la radiación XUV emitida en un extremo de la columna de plasma es reflejada y vuelve a atravesar el plasma) se alcanzó una amplificación de $g_0 \cdot l > 25$, alcanzando pues el régimen de saturación [83]. La energía medida fue de 30 μJ a 46.9 nm.

Los pulsos XUV resultantes de plasmas creados mediante descargas eléctricas tienen menos energía (un orden de magnitud menos) que los provenientes de plasmas creados mediante láseres. Sin embargo, la tasa de repetición es dos órdenes de magnitud mayor y el haz resultante presenta una coherencia mucho mayor, por lo que este método presenta ventajas incuestionables para muchas aplicaciones. Sin embargo, el límite actual de este método reside en la dificultad para reducir la longitud de onda de la radiación.

1.4.2. Optical Field Ionization (OFI)

En la sección 1.3.2 se describió la interacción no lineal de un haz láser intenso con los átomos de un gas. Éstos quedaban ionizados por efecto túnel al reducirse la barrera de potencial por el campo del láser. Los electrones libres eran acelerados por el campo y, al volver a colisionar con el ión, emitían radiación X coherente. También se explicó que para que los electrones colisionaran con el átomo era necesario que el haz láser estuviera polarizado linealmente. Si esto no es así, los electrones se separan de los iones, obteniendo un plasma.

Esto se puede observar facilmente usando un modelo semiclásico. El electrón libre experimenta una fuerza proporcional al campo eléctrico:

$$\mathbf{E}(\mathbf{t}) = \mathbf{E} \cos(\omega \mathbf{t}) \mathbf{e}_x + \alpha \mathbf{E} \sin(\omega \mathbf{t}) \mathbf{e}_y \quad (1.41)$$

donde $\alpha = 0$ para polarización lineal y $\alpha = 1$ para polarización circular. Resolviendo las ecuaciones del movimiento se obtiene la velocidad del electrón:

$$v_x(t) = \frac{qE}{m\omega} \sin(\omega t) + v_{0x} \quad (1.42)$$

$$v_y(t) = \alpha \frac{qE}{m\omega} \cos(\omega t) + v_{0y} \quad (1.43)$$

asumiendo como condiciones iniciales $v_{x0} = v_{y0} = 0$, para $t = \frac{2\pi n}{\omega}$ tenemos $v_x = 0$, $v_y = \alpha \frac{qE}{m\omega}$, es decir, el electrón tiene una velocidad de deriva que evita que el electrón vuelva a colisionar con el ión, quedando el átomo ionizado. Este efecto es máximo cuando $\alpha = 1$ es decir, cuando el haz está circularmente polarizado.

La energía cinética media de un electrón oscilando en un campo eléctrico de la forma $E \sin(kx - \omega t)$ es $\frac{q^2 E^2}{4m\omega^2}$. Cuando un electrón libre que inicialmente posee esta energía, viaja desde regiones donde existe un campo intenso a regiones donde el campo tiene una intensidad menor, su energía cinética de oscilación se convierte en energía cinética de deriva. Así pues, la energía mínima con la que el electrón aparece cuando escapa del átomo no es cero, sino $\frac{q^2 E^2}{4m\omega^2}$. Para un haz polarizado elípticamente esta energía es:

$$U_p = (1 + \alpha^2) \frac{q^2 E^2}{4m\omega^2} \quad (1.44)$$

La conclusión es que el número de fotones asociado con la ionización multifotónica es mayor que el esperado al tener unicamente en cuenta el potencial de ionización del átomo. Por esta razón, U_p se considera como parte del potencial de ionización.

El resultado de este proceso es la creación de iones por efecto túnel rodeados de electrones libres con suficiente energía cinética como para bombear

colisionalmente a los iones, creando la inversión de población necesaria para el efecto láser.

La demostración del esquema OFI tuvo lugar en 1993 [59], en un esquema de recombinación en la transición Lyman α del Litio hidrogenoide. El siguiente paso fue dado en 1995 por Lemoff y su equipo [53] al conseguir una amplificación $g \cdot l \approx 11$ en la línea de $\lambda = 41,8nm$ del Xe IX (Xenon paladioide) mediante excitación colisional. Los datos del experimento se han explicado en la sección anterior. El primer láser OFI saturado fue obtenido en el año 2000, por el equipo Sebban *et al* [88]. Un haz láser de Ti:Zafiro, polarizado circularmente, de 330 mJ y 35 fs fue enfocado en un jet de Xenon, obteniendo un coeficiente de ganancia $g \approx 67cm^{-1}$ y una amplificación de $g \cdot l \approx 15$ en la línea $\lambda = 41,8nm$ del Xe IX (Xenon paladioide). Es interesante recordar aquí que el primer láser de rayos X basado en la inyección de armónicos que alcanzó el régimen de saturación usaba también un plasma OFI [110]. Sin embargo, al ser el medio donde se creará el plasma un gas, la densidad de éste será necesariamente baja, pudiendo almacenar menos energía que los blancos sólidos, por lo que sería deseable, en aplicaciones en que la energía y la eficiencia sean importantes, usar estos últimos.

1.4.3. Blanco sólido

Los plasmas creados a partir de blancos sólidos presentan serias diferencias en comparación con los plasmas provenientes de gases. Estas diferencias vienen dadas principalmente por las superiores densidades del plasma alcanzadas en los blancos sólidos. Esto permite almacenar más energía en el plasma (si se dispone de la suficiente energía de bombeo, por supuesto) y, por tanto, extraer más energía en el haz. Sin embargo, en estos plasmas los gradientes de densidad son mucho mayores y la refracción del haz en el interior del plasma juega un papel fundamental que es necesario tener en cuenta a la hora de diseñar láseres de rayos X basados en blancos sólidos.

El plasma se crea mediante la interacción de un haz láser infrarrojo de energía relativamente alta y duración larga (del orden de nanosegundos) directamente en el blanco. Es conveniente que este haz principal sea precedido por un prepulso de menor intensidad, encargado de crear un pre-plasma que facilite la absorción del haz principal y que a su vez disminuya los gradientes de densidad electrónica que tienden a reflejar el haz de radiación X amplificada fuera de la zona de ganancia. Los iones son bombeados mediante excitación colisional con los electrones libres del plasma, que han obtenido su energía del pulso principal (esquema QSS) o bien de un segundo pulso más intenso (esquema TCE). Estos dos esquemas y ciertas mejoras dentro de ellos se describirán a continuación.

Quasy-Steady State

El esquema llamado *Quasy-Steady State* (estado cuasi-estacionario, QSS) se realiza focalizando linealmente un láser infrarrojo sobre un blanco sólido. La energía del haz láser es del orden de varios cientos de julios y su duración del orden del nanosegundo. Este pulso está precedido por un (o varios) prepulso para mejorar la calidad del plasma.

Este esquema permite el uso de una semi-cavidad, usando un espejo multicapa al final del plasma, de tal manera que la energía extraída y la calidad óptica del haz mejoran sensiblemente. Un ejemplo de láser de rayos X QSS con semi-cavidad es el laser de Zinc neonioide (21.1 nm) en PALS (Prague Asterix Laser System) [87]. Este sistema se usa actualmente en diferentes aplicaciones de los rayos X como son el estudio de ablación de materiales, diagnóstico de plasmas densos, etc ...

Transient Collisional Excitation

El segundo esquema, y en el que se ha basado los estudios computacionales de esta tesis, es el esquema colisional transitorio (*Transient Collisional Excitation* TCE [61]). En este esquema un pulso ultra corto ($0.5 \leq \tau \leq 10$ ps) interacciona con un plasma ya creado por un láser de nanosegundos, formado por iones multicargados neonoides o niqueloides. Los electrones absorben la energía del pulso ultracorto, excitando los iones al nivel superior de la transición láser. Por ello, la inversión de población existirá siempre y cuando el tiempo de calentamiento de los electrones sea muy inferior al tiempo de ionización del plasma debido a la impulsión corta.

Este esquema presenta ciertas ventajas sobre el esquema cuasi-estacionario, a saber:

- La inversión de población puede crearse en zonas de densidad electrónica arbitraria y ésta aumenta con la densidad.
- Este esquema es mucho menos sensible que el QSS a la cinética de poblaciones.
- A priori, no existe ninguna limitación en cuanto al tamaño del amplificador.

Los primeros resultados, publicados en [61] muestran ganancias elevadas usando láseres infrarrojos de energías reducidas.

La ganancia será nula cuando desaparezcan los iones neonoides o niqueloides, debido a que aumente su grado de ionización al haber absorbido el plasma la energía de la impulsión corta. Así pues, la duración de la ganancia

es del orden de decenas de picosegundos. Esto plantea un nuevo problema: la longitud del medio amplificador suele ser de varias decenas de milímetros, por lo que el tiempo en el que se dan condiciones de amplificación es demasiado corto como para que un fotón emitido al principio de la columna de plasma la recorra en su totalidad (la luz en el vacío necesita 33 ps para recorrer un centímetro). Este problema se soluciona haciendo que el frente de energía de la impulsión corta llegue con cierto ángulo, de tal manera que no se bombee todo el plasma al mismo tiempo, si no que la creación de una inversión de población esté sincronizada con la llegada del haz a amplificar. Este método se conoce con el nombre de onda viajera (*travelling wave*).

El bombeo transitorio presenta una ventaja adicional sobre el QSS: el tiempo que se deja evolucionar el plasma entre la llegada del pulso principal, que ioniza el plasma, y el pulso corto que crea la inversión de población puede controlarse en los experimentos. Este parámetro juega un papel fundamental ya que su variación permite formar un plasma con densidades suficientes de iones a la vez que los gradientes de densidad pueden reducirse con la expansión del plasma.

Una evolución reciente del esquema TCE es el bombeo en incidencia raste (GRazing Incidence Pumping, GRIP) [46]. En este esquema, el láser de bombeo no incide normal al blanco, como lo hace el láser largo sino que forma un ángulo pequeño con el blanco. Esto permite maximizar la absorción de la energía del láser en la zona donde se creará de ganancia, ya que el haz láser sufrirá reflexiones en densidades inferiores a la crítica, recorriendo una mayor longitud de plasma. La refracción del haz láser se debe a los gradientes de densidad electrónica en el interior del plasma. La densidad dónde se da esta reflexión viene dada por:

$$n_r = n_c \sin^2 \Phi \quad (1.45)$$

donde n_c es la densidad crítica del plasma y Φ es el ángulo de incidencia.

En esta tesis nos centraremos en el estudio de los plasmas creados a partir de blancos sólidos bombeados por colisión electrónica, con miras a optimizar la inyección de armónicos en la zona de ganancia; es decir, optimizaremos amplificadores XUV creados con el esquema TCE para inyección de armónicos de alto orden.

1.5. Conclusiones

En este capítulo se han presentado las diferentes aplicaciones de la radiación XUV coherente en diversos campos como son la biología (difracción), la física (física atómica y molecular en tiempo real) y la litografía entre otros,

con ejemplos recientes de los diferentes logros en estas áreas. Así mismo se han revisado las distintas fuentes disponibles en la actualidad que permiten (o permitirán en un futuro) desarrollar plenamente todas estas aplicaciones. Se han descrito brevemente los fundamentos físicos de estas fuentes, a saber, Láseres de Electrones Libres (FEL), Armónicos de Alto Orden (HHG) y Láseres de Rayos X basados en Plasmas. Al ser estos últimos el objetivo de estudio de esta tesis, se han descrito con mayor profundidad los distintos métodos de creación y amplificación del haz láser (recombinación, excitación colisional, inyección de armónicos) y de creación del plasma donde se dará la amplificación (descargas eléctricas, OFI y blancos sólidos). Esta tesis se encuadra dentro del estudio y optimización de los plasmas creados a partir de blancos sólidos por lo que en los capítulos siguientes se procederá a su estudio exhaustivo.

Capítulo 2

Física de los láser de radiación X blanda basados en plasmas

En el capítulo 1 se describieron las diferentes fuentes de radiación X coherente disponibles en la actualidad. De todas ellas, los amplificadores basados en plasmas son de interés para esta tesis. En concreto se estudiará la inyección de armónicos de alto orden en plasmas amplificadores creados usando el esquema TCE.

La inyección de armónicos en un amplificador OFI fue realizada por Zeitoun et. al. [110]; sin embargo, al ser el medio amplificador un gas, la energía que puede almacenar es baja. Así pues, el siguiente paso lógico consistía en inyectar radiación en plasmas más densos, es decir, creados a partir de blancos sólidos. Esto se ha logrado recientemente por Wang et. al. [106]. Sin embargo, en el estudio de estos experimentos y en la optimización de estas fuentes de radiación, es de vital importancia el modelado teórico. Para ello hay que tener en cuenta diversos mecanismos que tienen lugar desde los primeros instantes de la creación del plasma hasta la propagación del haz inyectado a través del amplificador. Así pues, en este capítulo se explicará la física básica de estos mecanismos (interacción plasma-láser, evolución hidrodinámica del plasma, mecanismos de creación de ganancia y propagación y amplificación de la radiación inyectada), mientras que en los capítulos siguientes se explicarán las herramientas usadas para modelar estos mecanismos.

2.1. Plasmas creados por láseres intensos

El módulo del campo eléctrico de un láser intenso es capaz de extraer electrones de los átomos de un sólido en tiempos muy cortos. Estos electrones colisionaran con los átomos de la red, extrayendo más electrones. Todos estos

electrones, que continúan siendo calentados por el láser, crean un plasma caliente y denso al colisionar con los átomos e iones. El plasma comienza a expandirse y, por conservación de la cantidad de movimiento, una onda de choque se propaga hacia el interior del blanco.

En un modelo unidimensional del plasma, se pueden diferenciar ciertas regiones en las que las características del plasma son diferentes. En general, estas regiones están relacionadas con alguno de los procesos que tienen lugar en el interior de los plasmas:

- Absorción de la energía del láser.
- Transporte de la energía.
- Ablación y expansión del plasma.
- Emisión y absorción de radiación.

Aunque en cada región se darán varios de estos procesos a la vez, en cada región predominará uno de ellos, pudiendo así diferenciarlas.

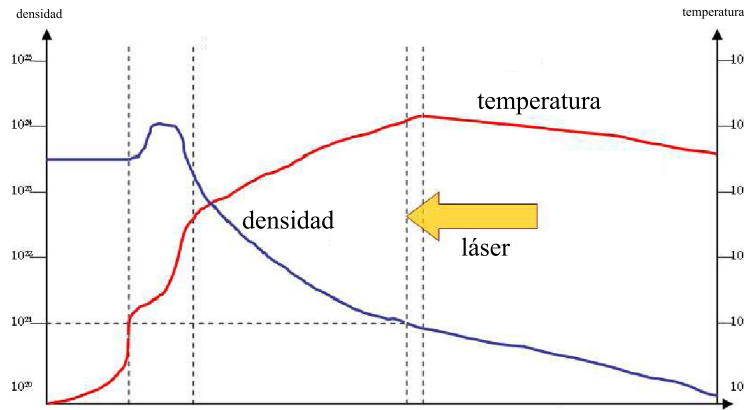


Figura 2.1: Estructura de un plasma creado por la interacción de un láser de nanosegundos con un blanco sólido.

2.1.1. La zona de densidad crítica

El parámetro básico para estudiar la interacción de la radiación electromagnética con la materia es la función dieléctrica $\epsilon(\omega)$ del medio. Esta función se puede obtener con aproximaciones clásicas o semiclásicas del movimiento

2.1. PLASMAS CREADOS POR LÁSERES INTENSOS

de los electrones en un campo eléctrico, como en la referencia [58] o como se obtendrá en el capítulo 8. Para un plasma, esta función toma la forma:

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (2.1)$$

donde $\omega_p^2 = \frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e}$ es la frecuencia del plasma [49]. El comportamiento de esta función es como sigue:

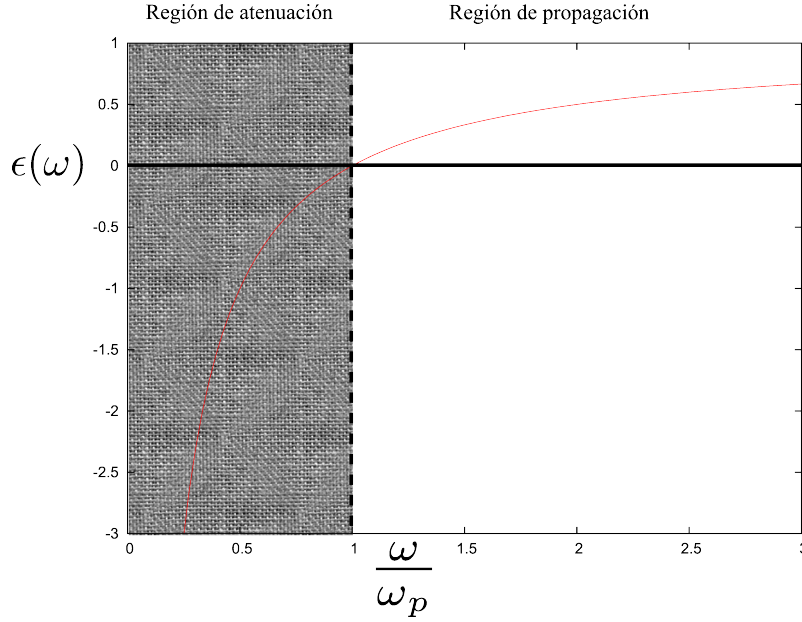


Figura 2.2: Función dieléctrica de un gas de electrones libres.

cuando la frecuencia de la radiación incidente ω es mayor que la frecuencia del plasma, la función dieléctrica es positiva y el índice de refracción (que depende de la raíz cuadrada de la función dieléctrica) es real. La solución de las ecuaciones de Maxwell es una onda que se propaga por el medio. Sin embargo, si la frecuencia del láser es menor que la del plasma, la función dieléctrica toma valores negativos y el índice de refracción es imaginario. Ya no existen soluciones oscilatorias de las ecuaciones de Maxwell. La única solución posible es una onda evanescente, que decae exponencialmente en el medio y, por tanto, el haz láser no puede penetrar en estas zonas.

El único parámetro variable en la frecuencia del plasma es la densidad electrónica. Así pues, para una frecuencia láser dada, existe una densidad para la cual la frecuencia del plasma es igual a la frecuencia del láser y se pasa del régimen ondulatorio al evanescente. Esta densidad se conoce como *densidad crítica* $n_c = \frac{\omega^2 \epsilon_0 m_e}{e^2}$. Así pues, el haz láser no puede penetrar en las

regiones de $n_e > n_c$. La reflexión del haz láser tiene lugar en esta zona del plasma.

La zona de densidad crítica no solo se caracteriza por la reflexión del haz láser, sino también porque el mecanismo principal de absorción de energía electromagnética es el llamado *absorción resonante*. Cuando la radiación láser con polarización P (el campo eléctrico oscila en el plano de incidencia) alcanza zonas cercanas a la densidad crítica con un ángulo de incidencia θ , los electrones comienzan a oscilar a lo largo del gradiente de densidad, excitados por la componente paralela a dicho gradiente del campo eléctrico. Esta oscilación induce fluctuaciones de carga (los iones se pueden considerar inmóviles frente a estas oscilaciones de los electrones). En la zona crítica, la frecuencia de esta fluctuación ω es igual a la frecuencia electrónica del plasma $\omega_{p,e}$. Se produce una resonancia y las oscilaciones crecen y se propagan a través del plasma. Como resultado, parte de la energía del láser se convierte en energía de oscilación de los electrones, que es absorbida por el plasma.

2.1.2. La zona sub-crítica

La zona del plasma con densidades electrónicas menores que la densidad crítica, creada por la expansión hidrodinámica del plasma, se conoce como la región sub-crítica. La extensión de esta zona depende del tiempo durante el cual se deja evolucionar el plasma. Para tiempos suficientemente largos (del orden de nanosegundos) esta región es la más extensa del plasma. Aquí se encuentra la corona del plasma, que es la parte del plasma de baja densidad y alta temperatura.

Así mismo, es en esta zona donde la mayor parte de la energía del láser es absorbida, siendo el principal mecanismo de absorción el Bremsstrahlung inverso. La radiación de frenado o Bremsstrahlung consiste en la deceleración de un electrón libre por interacción coulombiana con un átomo. El electrón pasa a un estado libre de menos energía. El exceso de energía es emitido como radiación. El proceso de Bremsstrahlung inverso es pues la absorción de un fotón por un electrón en presencia de un ion:

$$e^-(E) + ion + \hbar\omega = e^-(E + \Delta E) + ion$$

El coeficiente de absorción lineal por Bremsstrahlung inverso viene dado por

$$\kappa(\mu m^{-1}) = 3,236 \times 10^4 \cdot \frac{Z \ln \Lambda}{\lambda^2 (kT)^{3/2} \sqrt{1 - n_e/n_c}} \cdot \left(\frac{n_e}{n_c}\right)^2 \quad (2.2)$$

La estructura de esta región es particularmente importante en el estudio de los láser de rayos X basados en plasmas, ya que la zona de amplificación se produce en esta zona. Ya que las propiedades de esta zona están determinadas principalmente por la hidrodinámica, su estudio es crucial de cara a la optimización de estos amplificadores.

2.1.3. La zona de conducción

La zona de conducción se caracteriza por tener una densidad electrónica mayor que la densidad crítica. Como se ha explicado, la radiación láser es absorbida en las regiones sub-crítica y crítica. Al llegar a esta última región, el haz es reflejado y no puede penetrar hacia densidades superiores a la crítica. Así pues, el transporte de energía hacia el interior del plasma debe hacerse por otros mecanismos, en concreto conducción electrónica y transporte de radiación, dependiendo de la temperatura y del número atómico del material.

Para materiales de números atómicos Z bajos, el transporte de energía hacia densidades altas se realiza mediante conducción electrónica: $Q = -\kappa(T) \cdot \nabla T_e$. El espesor de esta zona dependerá del gradiente térmico que a su vez depende de la intensidad del láser y de su duración.

Cuando el número atómico Z es alto, la emisión y absorción de radiación X empieza a jugar un papel importante en la redistribución de energía. Las zonas a alta temperatura de la región subcrítica emiten radiación X. Estas zonas, ópticamente finas a dicha radiación, son atravesadas por los rayos X que continúan su trayectoria hasta zonas más densas donde son absorbidos y reemitidos. Esta radiación reemitida, que aproximadamente puede considerarse como radiación de cuerpo negro, se transmite hacia la corona, propagándose a través del plasma de baja densidad que es prácticamente transparente a esta radiación. Así pues, al espectro de emisión de la zona sub-crítica se le superpone un espectro quasi-planckiano proveniente de las múltiples absorciones y emisiones en la zona de conducción.

2.1.4. La zona comprimida

La interacción del láser con el blanco sólido frío provoca la ablación de la superficie, que es eyectada hacia el exterior y se expande formando el plasma descrito anteriormente. Por conservación de la cantidad de movimiento, la materia en el blanco comienza a comprimirse y una onda de choque se propaga hacia el interior del blanco, en dirección contraria a la expansión del plasma. En esta zona se alcanzan densidades mayores que la del sólido debido a la fuerte compresión. Sin embargo, esta zona no tiene mucha influencia

cuando se tratan láseres de rayos X, ya que la zona principal es la región sub-crítica.

2.2. Interacción del láser con el plasma

En esta sección se describirán brevemente los mecanismos de interacción de la radiación láser con un plasma, modelado como dos fluidos, uno de electrones y otro de iones. Esta explicación trata de ser un breve resumen de la expuesta en [51] y [24], por lo que, para un estudio más profundo es recomendable consultar dichas fuentes.

2.2.1. Ondas electromagnéticas en un plasma

Para comprender los fenómenos de interacción láser-plasma relevantes a esta tesis, bastará con estudiar la respuesta lineal (posteriormente se explicarán ciertas respuestas no lineales) del plasma a un campo de alta frecuencia ($\omega \geq \omega_{pe}$) de la forma:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{x}) \exp(-i\omega t) \quad (2.3)$$

El fluido iónico se trata como un fondo estacionario, encargado de mantener la neutralidad de la carga, de densidad $n_{0i}(\mathbf{x})$. La ecuación linealizada de la fuerza que sufre el fluido electrónico, si el efecto de las colisiones es despreciable, es

$$\frac{\partial \mathbf{u}_e}{\partial t} = -\frac{e}{m} \mathbf{E}(\mathbf{x}) \exp(-i\omega t) \quad (2.4)$$

Integrando esta ecuación y teniendo en cuenta que la densidad de corriente se define como $\mathbf{J} = -n_0(\mathbf{x})e\mathbf{u}_e$ tenemos

$$\mathbf{J} = \frac{i\omega_{pe}^2}{4\pi\omega} \mathbf{E} = \sigma \mathbf{E} \quad (2.5)$$

donde σ es la conductividad del plasma. Particularizando las ecuaciones de Maxwell para un campo electromagnético de la forma 2.3 y tomando rotacionales en las leyes de Faraday y Ampère, se obtiene una ecuación de ondas para el campo eléctrico (y similarmente, otra para el magnético), que en este caso particular resulta ser:

$$\Delta \mathbf{E} - \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \mathbf{E} = 0 \quad (2.6)$$

Se observa que la forma de la constante dieléctrica dada en la ecuación 2.1 aparece naturalmente al realizar esta deducción. Una primera aplicación de esta ecuación es deducir la relación de dispersión en un plasma no colisional y homogéneo, introduciendo una onda con variación espacial de la forma $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ en la ecuación de onda 2.6. El resultado es

$$\omega^2 = \omega_{pe}^2 + \kappa^2 c^2 \quad (2.7)$$

Como era de esperar, κ es imaginario cuando $\omega < \omega_{pe}$.

2.2.2. Incidencia oblicua en plasmas inhomogéneos

El siguiente paso en el estudio consiste en suponer cierta inhomogeneidad del plasma. Ésta es producida principalmente por la expansión del plasma por lo que supondremos que todas las variaciones se dan a lo largo del eje z . Así pues, no existirán variaciones en la dirección x de la figura 2.3 (es decir, $k_x = 0$ y $\frac{\partial}{\partial x} = 0$). Así mismo, los números de onda en las direcciones y , z son $k_y = (\omega/c) \cos \theta$ y $k_z = (\omega/c) \sin \theta$.

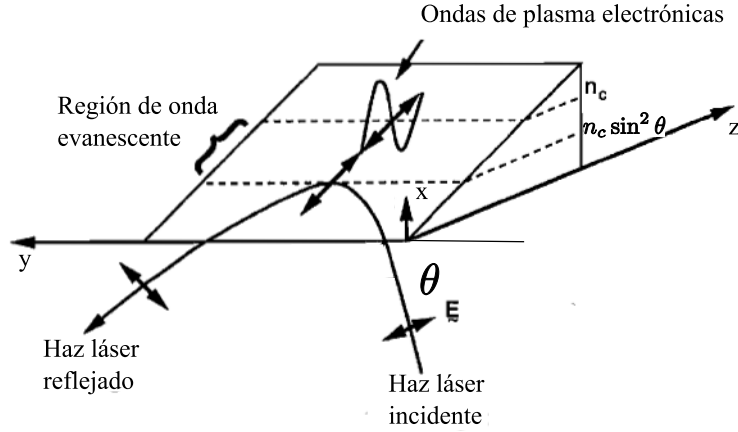


Figura 2.3: Diagrama esquemático de la incidencia oblicua en plasmas con un gradiente de densidad. Figura obtenida de [24].

La propagación de la onda depende en este caso de la polarización de esta. Si el vector campo eléctrico es perpendicular al plano de incidencia (es decir $\mathbf{E} = E_x(y, z)\mathbf{x}$) se dice que la onda está s-polarizada. En este caso, la ecuación 2.6 queda

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon(z) E_x = 0 \quad (2.8)$$

Como la función dieléctrica depende únicamente de la coordenada z , el número de onda k_y debe conservarse y la ecuación anterior se simplifica a

$$\frac{d^2 E(z)}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} (\epsilon(z) - \cos^2 \theta) E(z) = 0 \quad (2.9)$$

El primer hecho constatable es que, en incidencia oblicua, la refracción de la luz se da cuando

$$\epsilon(z) = \cos^2 \theta \quad (2.10)$$

lo que equivale a decir que en incidencia oblicua el plasma se refracta a densidades electrónicas menores que la crítica

$$n_e = n_{cr} \sin^2 \theta \quad (2.11)$$

ecuación que se avanzó en el capítulo anterior al hablar del esquema GRIP.

En el caso de que el vector campo eléctrico este contenido en el plano de incidencia, se dice que la onda está p-polarizada. A diferencia de las ondas s-polarizadas, ahora una componente del vector eléctrico hace oscilar a los electrones a lo largo del gradiente de densidad (matemáticamente esto se expresa como $\mathbf{E} \cdot \nabla n_e \neq 0$). Estas oscilaciones de carga pueden excitar resonantemente ondas en el plasma, absorbiendo parte de la energía de la onda electromagnética, fenómeno denominado como *absorción resonante*.

El campo eléctrico de una onda p-polarizada se escribe como $\mathbf{E} = E_y(y, z)\mathbf{y} + E_z(y, z)\mathbf{z}$. Como $\epsilon \equiv \epsilon(z)$ la ecuación de Poisson se reescribe de esta manera

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} E_z \quad (2.12)$$

El campo adquiere una componente electrostática, debido a la variación de la constante dieléctrica con la coordenada z y se puede observar a su vez la respuesta resonante cuando $\epsilon = 0$, es decir cuando la frecuencia del plasma se iguala a la de la onda. Como se ha explicado, en incidencia oblicua las ondas electromagnéticas se reflejan antes de alcanzar la densidad crítica, por lo que podría parecer que nunca se alcanza la condición de resonancia. Sin embargo esto no es cierto, ya que cuando la frecuencia de la onda es menor que la del plasma, el número de onda es imaginario (se puede ver de manera simplificada en la ecuación 2.7) y el campo decae exponencialmente con la distancia. Así pues, si la reflexión tiene lugar en las proximidades de la densidad crítica, el campo puede alcanzar esta zona (aunque sufriendo una atenuación exponencial) y excitar ondas en el plasma a través de la absorción resonante.

2.2. INTERACCIÓN DEL LÁSER CON EL PLASMA

La tasa de calentamiento por la excitación resonante de ondas en el plasma resulta ser, siguiendo los cálculos realizados en, por ejemplo [24]

$$Q = \Phi^2(\tau) \frac{|E_z|^2}{4\pi} c \quad (2.13)$$

donde $\tau = (L\omega/c)^{1/3}$. En la expresión exacta de $\Phi(\tau)$ aparecen funciones de Airy y sus derivadas. Una aproximación más sencilla de computar es:

$$\Phi(\tau) \approx 2,31\tau e^{-\frac{2}{3}\tau^3} \quad (2.14)$$

representada en la figura 2.4.

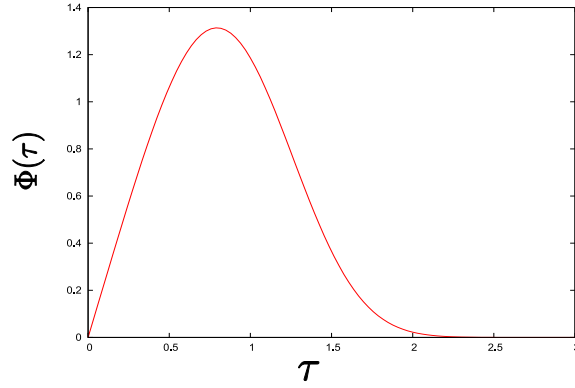


Figura 2.4: Estimación de $\Phi(\tau)$.

2.2.3. Absorción colisional

La absorción resonante tiene lugar en la región de densidad crítica, donde se excitan plasmones que luego ceden su energía a través de colisiones y otros mecanismos (amortiguación de Landau). Sin embargo, lejos de la zona de densidad crítica, la condición de resonancia no se cumple y la absorción resonante no tiene lugar. En estas zonas, el mecanismo predominante de interacción láser-plasma es la absorción colisional (o Bremsstrahlung inverso). Los fotones interactúan inelásticamente con los electrones del plasma, cediendo parte de su energía a estos. El análisis de este mecanismo parte también de la ecuación de la fuerza linealizada y con un término colisional:

$$\frac{\partial \mathbf{u}_e}{\partial t} = -\frac{e}{m} \mathbf{E} - \nu_{ei} \mathbf{u}_e \quad (2.15)$$

Teniendo en cuenta que el campo eléctrico varía armónicamente, se puede integrar la ecuación diferencial y obtener de la definición de densidad de

corriente la conductividad, que ahora toma valores complejos

$$\sigma = \frac{i\omega_{pe}^2}{4\pi(\omega + i\nu_{ei})} \quad (2.16)$$

De nuevo, a partir de las ecuaciones de Maxwell se puede deducir una ecuación de onda para el campo eléctrico de la forma 2.6 con la salvedad de que la función dieléctrica del plasma es ahora compleja

$$\epsilon = 1 - \frac{\omega_{pe}^2}{\omega(\omega + i\nu_{ei})} \quad (2.17)$$

Similarmente, la ecuación de dispersión toma la forma

$$\omega^2 = \kappa^2 c^2 + \omega_{pe}^2 \left(1 - \frac{i\nu_{ei}}{\omega}\right) \quad (2.18)$$

donde se ha asumido que $\nu_{ei}/\omega \ll 1$. Estamos interesados en conocer el decaimiento de energía del haz láser al atravesar una longitud diferencial en el plasma, por lo que el siguiente paso es descomponer el número de onda en sus partes reales e imaginarias, siendo el coeficiente de absorción la parte imaginaria:

$$\kappa_i = \frac{\omega_{pe}^2 \nu_{ei}}{\omega^2 v_g} \quad (2.19)$$

donde $v_g = kc^2/\omega$ es la velocidad de grupo de la onda y $\nu_{ei} \approx \nu_{ei}^{90} \approx 3 \times 10^{-6} \ln \Lambda \frac{n_e Z}{k T_e^{3/2}}$ es la frecuencia de colisión electrón-ión, aproximada por la frecuencia de dispersión a 90°. Con estas aproximaciones se obtiene el valor del coeficiente dado en la ecuación 2.2.

2.2.4. Excitación paramétrica

Como se ha explicado, un campo eléctrico que oscila en una dirección en la que existan gradientes de densidad electrónica induce fluctuaciones de carga. Si la frecuencia del láser esta próxima a la del plasma, un plasmón es excitado resonantemente. En el caso de la absorción resonante, el gradiente de densidad estaba producido por la expansión del plasma. Cuando las variaciones de densidad están producidas por fluctuaciones de la densidad iónica, inducidas por fonones, pueden provocar el acoplamiento de la radiación y un plasmones o fonones. En esta sección trataremos brevemente los fenómenos de Dispersión Raman Estimulada y Dispersión de Brillouin Estimulada, como ejemplos de excitación paramétrica. Cuando el resultado de la interacción con el plasma de una onda luminosa es otra onda luminosa dispersada y

un plasmón se ha producido una Dispersión Raman Estimulada. Si en lugar del plasmón aparece un fonón, estamos en el caso de Dispersión Brillouin Estimulada.

En ambos casos, las frecuencias y números de onda de las ondas involucradas han de cumplir

$$\omega_0 = \omega_s + \omega \quad (2.20)$$

$$\mathbf{k}_0 = \mathbf{k}_s + \mathbf{k} \quad (2.21)$$

donde ω_0, ω_s son las frecuencias de la onda incidente y dispersada. ω es pues la frecuencia del plasmón o del fonón, según sea Raman o Brillouin. Se ha usado la misma notación para los números de onda. Debido a que la mínima frecuencia de una onda luminosa en el plasma es ω_{pe} está claro que la frecuencia de la onda tiene que cumplir la condición $\omega_0 > 2\omega_{pe}$ para poder producirse la Dispersión Raman Estimulada. Esto se traduce en que la densidad en la que se puede producir este mecanismo ha de ser menor que un cuarto de la densidad crítica $n < \frac{n_{cr}}{4}$. La energía depositada en el plasmón termina calentando el plasma a través de diferentes procesos (como pueden ser las colisiones), aunque también puede crear electrones de alta energía. Por el contrario la Dispersión Brillouin Estimulada puede darse en cualquier parte del plasma siempre que su densidad sea menor que la crítica, ya que la frecuencia del fonón es mucho menor que la de la luz ($\omega \ll \omega_0$).

La aparición de inestabilidades, tanto Raman como Brillouin, puede explicarse de esta manera: Una perturbación inicial de densidad δn produce, en presencia del campo eléctrico del láser, una corriente transversal proporcional a $\delta n \cdot E_0$. Así mismo, esta corriente da lugar a una onda dispersada con campo eléctrico E_s . La fuerza ponderomotriz es proporcional a $\nabla(E_0 E_s)$. Esta fuerza puede a su vez aumentar la perturbación inicial de densidad δn . Si las frecuencias y números de onda cumplen las condiciones requeridas, la perturbación en densidad crece indefinidamente. Las relaciones de dispersión, tasas de crecimiento y ciertos umbrales de aparición de estas inestabilidades pueden consultarse en la literatura [51, 24].

El estudio de estas inestabilidades es de gran importancia en Fusión por Confinamiento Inercial. En concreto, la generación de electrones de alta energía a través de la Dispersión Raman Estimulada puede provocar el precalentamiento del combustible, dificultando la ignición en el momento óptimo. En el caso de plasmas amplificadores de radiación XUV, la generación de estos electrones representaría una deposición no local de energía, fuera de la zona de ganancia, perdiendo eficiencia. Sin embargo, existe un umbral de aparición de las inestabilidades en el plasma, del orden de $I_L \lambda_L^2 \approx 10^{15} W \mu m^2 / cm^2$ [6]. En los casos que se estudiarán en esta tesis, este umbral no llega a alcanzarse, aunque es cierto que los pulsos cortos usados para calentar los electrones

están cerca de este umbral. Por ello, se ha considerado instructivo añadir una pequeña parte sobre estas inestabilidades.

2.3. Creación de ganancia en un amplificador basado en plasma

Los átomos altamente ionizados que poseen configuraciones electrónicas con capas completas, como neonoides (10 electrones, $2p^6$) o niqueloides (28 electrones, $3d^{10}$) son estables en intervalos de temperatura y densidad relativamente grandes. Son, por tanto, los mejores candidatos para producir el efecto láser.

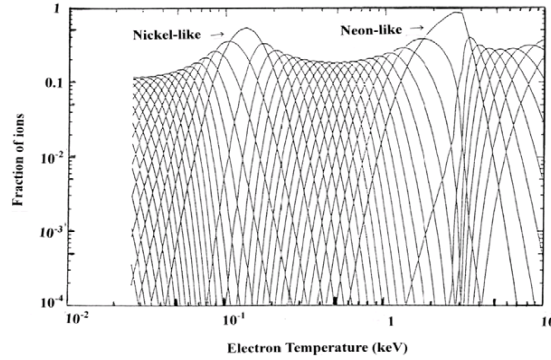


Figura 2.5: Abundancia de iones neonoides y niqueloides para un plasma de estaño en función de la temperatura. Obtenido de [37]

La figura 2.5 muestra la abundancia de los iones neonoides y niqueloides en un plasma en equilibrio colisional y radiativo para una densidad electrónica de $n_e = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

En los láseres basados en plasmas, los electrones ligados del nivel fundamental del ión, por ejemplo $3d^{10}$ para los niqueloides, son excitados por las colisiones con los electrones libres del plasma poblando el nivel 4 del ión. La inversión de población se produce entre los niveles $3d^9 4p$ y $3d^9 4s$ a causa de las diferentes tasas de desexcitación radiativa entre estos dos niveles. Las transiciones láser para un ión neonode se dan entre niveles $3s - 3p$.

Así pues, necesitamos un plasma en el que abunden los iones en los que se da la transición láser y además, para favorecer la excitación colisional, el plasma ha de ser denso y estar a alta temperatura. El estudio de la población de iones y de los niveles en cada ión se realiza mediante la cinética de poblaciones.

2.3.1. Cinética de poblaciones

Como se verá más adelante, para calcular la ganancia del plasma amplificador, es necesario conocer

1. Las poblaciones de iones niqueloides o neonoides, responsables de la amplificación.
2. Las poblaciones de dichos iones que se encuentran en los estados fundamentales y excitados de dicha transición.
3. Las poblaciones del resto de estados que influyen en la creación de la inversión de población, a través de mecanismos como la excitación colisional, radiativa, etc...

Cuando se cumplen las condiciones de equilibrio termodinámico local (LTE), las poblaciones de iones siguen la conocida ecuación de Saha

$$\frac{N_{\zeta} n_e}{N_{\zeta-1}} = 2 \left(\frac{mc^2 T_e}{2\pi(\hbar c)^2} \right)^{3/2} \frac{z_{\zeta}(T_e)}{z_{\zeta-1}(T_e)} \exp \left(-\frac{E_{\zeta-1} - \Delta E_{\zeta-1}}{T_e} \right) \quad (2.22)$$

La población de los diferentes estados excitados $N_{\zeta,m}$ siguen una distribución de Boltzmann:

$$N_{\zeta,m} = N_{\zeta} \frac{g_{\zeta,m} \exp(-E_{\zeta,m}/T)}{Z_{\zeta}(T)} \quad (2.23)$$

donde $Z_{\zeta}(T)$ es la función de partición del estado iónico correspondiente.

Las condiciones de equilibrio termodinámico local se dan en plasmas que evolucionan lentamente, dando tiempo a electrones e iones para equilibrarse termodinámicamente. Los plasmas creados con pulsos láser de alta intensidad (como puede ser el pulso corto de los láseres colisionales transitorios) evolucionan muy rápidamente y no se cumplen las condiciones de equilibrio termodinámico local. Además, la ecuación 2.23 nos indica el conocido resultado de que en equilibrio termodinámico no se puede dar una inversión de población. Así pues, en casos fuera del equilibrio, es necesario resolver el sistema de ecuaciones diferenciales que describe las tasas de población y vaciado de los diferentes estados:

$$\frac{dN_{\zeta,m}}{dt} = \sum_{j < m} n_e \mathcal{X}(\zeta, j \rightarrow \zeta, m) N_{\zeta,j} - \quad (2.24)$$

$$- \left(\sum_{j < m} n_e \mathcal{Y}(\zeta, m \rightarrow \zeta, j) + A_{mj} \right) N_{\zeta,m} - \quad (2.25)$$

$$- \sum_{j>m} n_e \mathcal{X}(\zeta, m \rightarrow \zeta, j) N_{\zeta, m} + \quad (2.26)$$

$$+ \left(\sum_{j>m} n_e \mathcal{Y}(\zeta, j \rightarrow \zeta, m) + A_{jm} \right) N_{\zeta, j} + \quad (2.27)$$

$$+ n_e [A_r(\zeta + 1, 1 \rightarrow \zeta, m) + A_{2e}(\zeta + 1, 1 \rightarrow \zeta, m) + \\ + n_e A_c(\zeta + 1, 1 \rightarrow \zeta, m)] N_{\zeta+1, 1} - \quad (2.28)$$

$$- n_e S_c(\zeta, m \rightarrow \zeta + 1, 1) N_{\zeta, m} - \quad (2.29)$$

$$- \delta_{m,1} \sum_k n_e [A_r(\zeta, m \rightarrow \zeta - 1, k) + A_{2e}(\zeta, m \rightarrow \zeta - 1, k) + \\ + n_e A_c(\zeta, m \rightarrow \zeta - 1, k)] N_{\zeta, m} + \quad (2.30)$$

$$+ \delta_{m,1} \sum_k n_e S_c(\zeta - 1, k \rightarrow \zeta, m) N_{\zeta-1, k} \quad (2.31)$$

En estas ecuaciones ζ indica el ión, m el nivel energético de dicho ión y n_e la densidad electrónica. Los distintos niveles dentro de un ión concreto están acoplados por las líneas 2.24 (excitación colisional desde los niveles inferiores), 2.25 (desexcitación colisional desde el nivel m a los niveles inferiores), 2.26 (excitación colisional desde el nivel m a los niveles superiores) y 2.27 (desexcitación colisional desde los niveles superiores a m). En ellas, $\mathcal{X}(\zeta, j \rightarrow \zeta, m)$ indica la tasa de excitación electrónica desde el nivel j hasta el nivel m en el ión ζ , $\mathcal{Y}(\zeta, m \rightarrow \zeta, j)$ la tasa de desexcitación electrónica desde el nivel j hasta el nivel m en el ión ζ y A_{mj} la tasa de emisión espontánea del nivel m al j (se sobreentiende que en el ión ζ). Los procesos que ligán las poblaciones de los distintos iones se tienen en cuenta en las siguientes líneas 2.28 (recombinación del ión superior al ζ) y 2.30 (recombinación del ión ζ al inferior) e ionización colisional 2.31, 2.29. A_r, A_{2e}, A_c representan las tasas de recombinación radiativa, dielectrónica y colisional a tres cuerpos respectivamente, mientras que S_c representa la tasa de ionización colisional.

Como ejemplo, y en un modelo muy simplificado de tratamiento del hierro neonioide, se podrían tomar como iones el propio hierro neonioide Fe^{16+} , fluorimioide Fe^{17+} y sodiumioide Fe^{15+} . Las poblaciones de estos iones están acopladas a través de las ecuaciones 2.28, 2.29, 2.30, 2.31. Así mismo, los niveles del hierro neonioide están acoplados entre si a través del resto de las ecuaciones.

Un cálculo preciso de las poblaciones requiere tener en cuenta un gran número de niveles dentro de cada ión, lo cual hace que la resolución del sistema de ecuaciones sea muy costoso computacionalmente. Así mismo, estas ecuaciones deberían estar acopladas al tratamiento de la radiación, ya que ciertas transiciones pueden ser estimuladas por ésta. Por todo esto, en los cálculos de poblaciones es necesario introducir ciertas simplificaciones para

poder resolver en un tiempo aceptable el sistema de ecuaciones.

En nuestro caso, las aproximaciones realizadas se expondrán en capítulos posteriores, aunque podemos adelantar que la población de iones se calcula suponiendo equilibrio termodinámico local (el plasma es creado mediante pulsos relativamente largos) y que el cálculo de poblaciones de los niveles de la transición se realiza suponiendo estado estacionario y teniendo en cuenta únicamente excitación colisional y desexcitación colisional y radiativa. Por ello, se dedica la siguiente parte a tratar brevemente las tasas de excitación y desexcitación colisional que usaremos, ya que la desexcitación radiativa se tratará a través de los coeficientes de Einstein [23].

2.3.2. Excitación colisional

Como ya se ha explicado, la excitación colisional de un ión al impactar un electrón libre es el proceso fundamental para crear la inversión de población en el plasma. La excitación colisional es un proceso estudiado desde hace décadas por su interés en astrofísica por lo que existen métodos elaborados para calcular secciones eficaces y tasas de colisión.

La sección eficaz se puede escribir como:

$$\sigma_{i,j} = \frac{\Omega_{ij}}{g_i \Delta E} \pi a_0^2 \quad (2.32)$$

donde $g_i = 2J + 1$ y a_0 es el radio de Bohr. Ω_{ij} es la fuerza de la colisión que depende de la estructura del átomo y de la energía del electrón incidente.

La tasa de excitación se obtiene integrando sobre la velocidad de los electrones libres. En el caso de una distribución Maxwelliana se tiene

$$C_{ij} = \frac{8,63 \times 10^{-6}}{g_i T_e^{1/2}} \int_{\Delta E}^{\infty} \Omega_{ij}(E) \exp\left(-\frac{E}{kT_e}\right) d\left(\frac{E}{kT_e}\right) \quad (2.33)$$

La simetría de la fuerza de colisión $\Omega_{ij} = \Omega_{ji}$ resultante de la simetría del problema de colisión mecano-cuántica, asegura que se cumple el balance detallado, pudiendo escribir para la desexcitación colisional

$$C_{ji} = \frac{g_i}{g_j} C_{ij} \exp\left(\frac{\Delta E}{kT_e}\right) \quad (2.34)$$

La tasa de excitación puede calcularse aproximadamente con la fórmula de Van Regemorter [79]. Escribiendo la fuerza de la colisión en términos de la fuerza del oscilador se tiene

$$\Omega_{ij} = \frac{8\pi}{\sqrt{3}} \frac{1}{k_i^2} \frac{f_{ij}}{\Delta E(Ry)} g \pi a_0^2 \quad (2.35)$$

Para el caso que nos ocupa, siguiendo la aproximación de Van Regemorter, se puede utilizar un valor $g \approx 0,2$ para el factor de Gaunt. Integrando la fuerza de la colisión sobre una distribución maxwelliana de velocidades, se obtiene

$$C_{ij} = 1,6 \times 10^{-5} \frac{f_{ij} g}{\Delta E (kT_e)^{1/2}} \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT_e}\right) \quad (2.36)$$

donde ΔE y kT_e se dan en eV .

2.3.3. Otros mecanismos de inversión

Como se ha explicado, en esta tesis sólo se ha tenido en cuenta la excitación colisional como mecanismo de creación de ganancia en la transición $J=0$ - $J=1$ del hiero neonioide. Sin embargo, existe otros mecanismos que pueden producir la inversión de población como pueden ser la ionización de capas internas ($2s^2 2p^6 3l + e \rightarrow 2s^2 2p^5 3l + 2e$) de iones sodiumoides y la recombinación dielectrónica de iones fluoroides ($2s^2 2p^5 + e \rightarrow 2s^2 2p^5 3l + h\nu$).

En [31] se estudió la importancia relativa de estos mecanismos en la creación de ganancia en el Selenio neonioide.

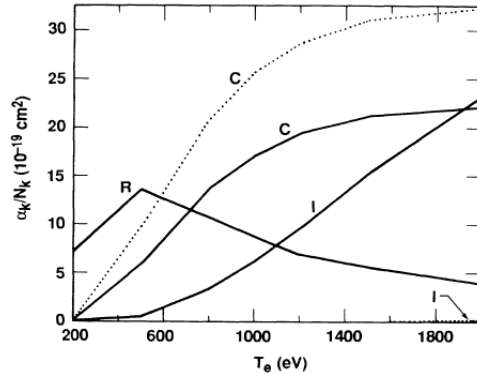


Figura 2.6: Coeficiente de ganancia por densidad del ión fuente (cm^2) de las transiciones $2p^5 3p - 2p^5 3s$ del selenio neonioide, en función de la temperatura electrónica para una densidad electrónica de $n_e = 5 \times 10^{20} cm^{-3}$. Las líneas de puntos se refieren a la transición $J=0$ - $J=1$ (la de interés para esta tesis) y las continuas a la $J=2$ - $J=1$. I indica la ionización de capa interna, C excitación colisional y R la recombinación dielectrónica. Figura obtenida de [31].

En la figura 2.6 se observa la ganancia dividida por la densidad de iones fuente para cada uno de estos mecanismos. Se observa claramente que, para la transición $J=0-J=1$, la excitación colisional domina al resto de mecanismos en todo el rango de temperaturas de interés, por lo que está justificado tener en cuenta únicamente este mecanismo, despreciando la ionización de capa interna y la recombinación dielectrónica.

2.4. Propagación y amplificación de radiación XUV

Tanto la radiación emitida espontáneamente (ASE) como los armónicos inyectados en el plasma, van a sufrir diferentes procesos al atravesar la columna de plasma. Este plasma es un medio inhomogéneo, presentando gradientes de densidad electrónica que puede refractar el haz fuera de la zona de interés si éstos no se controlan adecuadamente. Así mismo, al existir una inversión de población en el plasma, el haz que lo atraviesa irá amplificando su energía. La amplificación conlleva una disminución de la población del nivel superior que, para intensidades suficientemente altas, será necesario tenerla en cuenta, reduciéndose la amplificación del haz y alcanzando un régimen de saturación. Así mismo, el ancho espectral de la radiación sufrirá cambios dependiendo de las propiedades del plasma, siendo de vital importancia comprender estos efectos de cara a la optimización de la inyección de armónicos. En esta sección se estudiarán cada uno de estos procesos.

2.4.1. Refracción del haz de radiación X

Como se ha explicado anteriormente, la dinámica de la zona donde se crea la ganancia está controlada principalmente por la expansión hidrodinámica del plasma. Esta expansión genera gradientes de densidad electrónica en la región de amplificación que pueden ser relativamente elevados, sobre todo en plasmas provenientes de blancos sólidos. El índice de refracción del plasma se puede tomar como la raíz cuadrada de la función dieléctrica, que depende de las densidades electrónicas a través de las frecuencias:

$$n(\mathbf{x}) = \sqrt{\epsilon(\omega)} = \sqrt{1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}} = \sqrt{1 - \frac{n_e(\mathbf{x})}{n_c}} \quad (2.37)$$

Este valor del índice de refracción se ha obtenido asumiendo un comportamiento monocromático (el índice depende de la frecuencia únicamente a

través de la densidad crítica, calculada en el centro de la raya). En el capítulo 8 se dará una deducción más detallada. En los casos en los que se aplicará esta fórmula (modelización de los esquemas ASE e inyección de armónicos) esta aproximación es perfectamente válida, ya que la anchura espectral de las líneas a amplificar son muy pequeñas $\frac{\Delta\lambda}{\lambda} \approx 10^{-4}$ y el mismo proceso de amplificación reduce la anchura de la línea.

Los gradientes de densidad electrónica inducen pues gradientes de índice de refracción, curvando las trayectorias de los rayos del haz a amplificar ya que estos siguen la ecuación de *eikonal*:

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{d\mathbf{r}}{ds} \right) = \nabla n(\mathbf{x}) \quad (2.38)$$

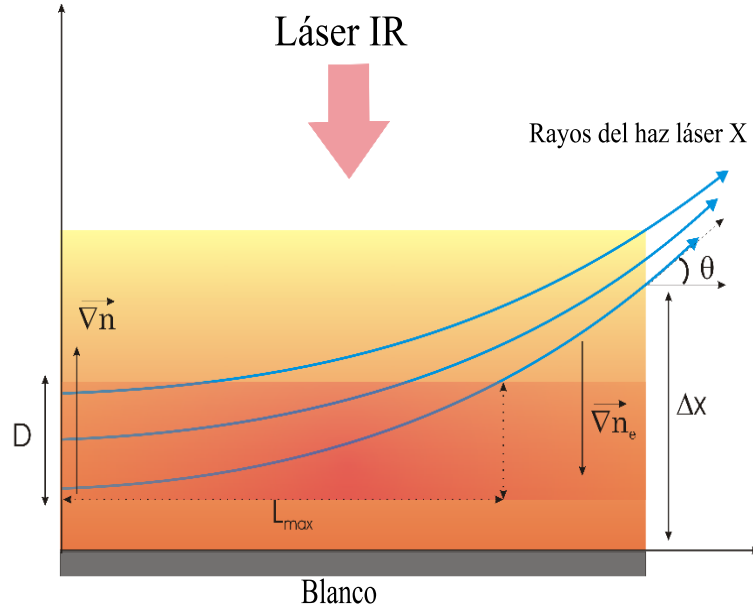


Figura 2.7: Refracción y propagación de los rayos que componen el haz de radiación X-UV en un plasma con fuertes gradientes de densidad. Figura obtenida de [12].

La solución de esta ecuación mediante trazado de rayos se explicará en apartados posteriores, ya que se usa en la deposición de la energía láser con una subrutina del código ARWEN y en el estudio de la amplificación de la radiación emitida con el código SHADOX. Es posible también obtener soluciones aproximadas, que permitan estimar la desviación angular del haz al atravesar el medio amplificador.

2.4. PROPAGACIÓN Y AMPLIFICACIÓN DE RADIACIÓN XUV

En la aproximación paraxial, restringiendonos a una dimensión longitudinal (z) y una transversal (x) y suponiendo que $n \equiv n(x)$, la ecuación de eikonal se escribe como:

$$n(x) \frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{dn(x)}{dx} \quad (2.39)$$

En los láseres de radiación X basados en plasma, aún en los de blanco sólido, se da que $n_e \ll n_c$ por lo que el índice de refracción se puede aproximar como:

$$n(x) = 1 - \frac{1}{2} \frac{n_e(x)}{n_c} \approx 1 \quad (2.40)$$

Si, para poder obtener una solución analítica aproximamos el perfil de densidad electrónica por una recta

$$n_e(x) = n_{e,0} \cdot \left(1 - \frac{x}{x_0}\right) \quad (2.41)$$

Y la ecuación simplificada a resolver es

$$\frac{d^2 x}{dz^2} = \frac{1}{2} \frac{n_{e,0}}{n_c x_0} \quad (2.42)$$

El resultado es una trayectoria parabólica:

$$x(z) = \frac{n_1}{2} z^2 + \alpha_0 z + x(0) \quad (2.43)$$

con $n_1 = \frac{1}{2} \frac{n_{e,0}}{n_c x_0}$, α_0 es el ángulo inicial del rayo y $x(0)$ la posición inicial del rayo. Así, la deflexión Δx del rayo, al empezar en $x(0) = 0$ y con ángulo nulo, al recorrer una distancia L (aproximando $\nabla n_e \approx \frac{n_e}{x_0}$ y teniendo en cuenta que $n_c = \frac{1,1 \times 10^{21}}{\lambda^2(\mu m)} (cm^{-3})$, viene dada por:

$$\Delta x(cm) \approx 4,54 \times 10^{-22} L^2(cm) \lambda^2(\mu m) \nabla n_e(cm^{-4}) \quad (2.44)$$

Esta aproximación será utilizada para estimar diversos parámetros de los amplificadores láser a estudiar.

2.4.2. Amplificación del haz

En un plasma caliente, diferentes procesos como la excitación colisional de la que ya hemos hablado, pueblan los niveles superiores de los iones. El decaimiento de estos iones excitados se produce emitiendo radiación. La

emisividad $j(\nu)$ se define como la densidad espectral de energía emitida, por unidad de volumen y por segundo.

$$j(\nu) = N_2 h \nu A(\nu) \quad (2.45)$$

El coeficiente de Einstein $A(\nu)$ se puede escribir como la probabilidad total A de emisión espontánea en la transición $2 \rightarrow 1$ multiplicada por una función normalizada que determina la distribución espectral de la emisión:

$$A(\nu) = A\Phi(\nu)$$

La emisividad en el pico de la distribución espectral será

$$j_0 \equiv j(\nu = \nu_0) = N_2 h \nu_0 A\Phi(\nu_0) \quad (2.46)$$

El coeficiente de ganancia $g(\nu)$ se define como

$$g(\nu) = \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 \right) \frac{c^2}{8\pi\nu^2} A\Phi(\nu) \quad (2.47)$$

y de la misma manera se define la ganancia en el pico de la distribución g_0 .

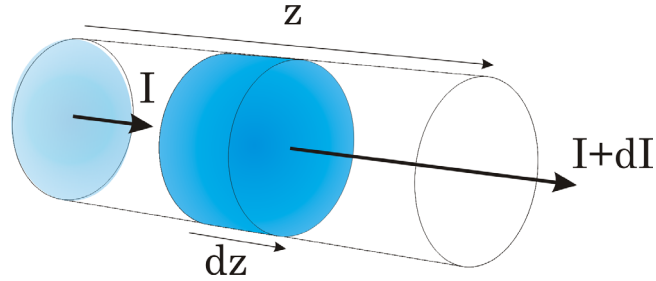


Figura 2.8: Esquema del transporte de radiación a través de un cilindro de plasma.

Suponiendo un plasma homogéneo (no consideramos efectos de refracción) y estacionario, de volumen cilíndrico dV y de longitud dz , podemos escribir una ecuación para la intensidad de radiación:

$$\frac{dI(\nu)}{dz} = j(\nu) + g(\nu) \cdot I(\nu) \quad (2.48)$$

2.4. PROPAGACIÓN Y AMPLIFICACIÓN DE RADIACIÓN XUV

Integrando esta ecuación para una longitud L obtenemos la intensidad emitida por una columna de plasma de dicha longitud

$$\begin{aligned} I(\nu, L) &= \frac{j(\nu)}{g(\nu)} (e^{g(\nu) \cdot L} - 1) \\ &= S(\nu) \cdot (e^{g(\nu) \cdot L} - 1) \end{aligned} \quad (2.49)$$

donde $S(\nu)$ es el término fuente.

La expresión 2.49 muestra que, cuando se da una inversión de población, la intensidad aumentará con la longitud del plasma (este régimen se conoce con el nombre de régimen de señal débil, ya que la población de los niveles no depende de la intensidad).

Como en las transiciones consideradas la frecuencia en el pico de la raya es varios ordenes de magnitud superior al ancho de banda se puede aproximar ν por ν_0 aproximando el término fuente por

$$S(\nu) \approx \frac{j_0}{g_0}$$

Normalmente, los espectrómetros utilizados para observar la emisión tienen una resolución superior al ancho de banda. Así pues, la emisión del plasma es integrada por los detectores:

$$\int_{-\infty}^{\infty} I(\nu) d\nu = \frac{j_0}{g_0} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{g(\nu)l} - 1) d\nu \quad (2.50)$$

La integral 2.50 depende de la distribución espectral del coeficiente de ganancia. Para el caso de un perfil Doppler $g(\nu) = g_0 \exp\left(-\left(\frac{\nu-\nu_0}{a}\right)^2\right)$ y centrandonos en el esquema ASE ($I(\nu, 0) = 0$) esta integral se puede aproximar por

$$I = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{\ln 2}} \Delta\nu \frac{j_0}{g_0} \frac{(e^{g_0 l} - 1)^{3/2}}{\sqrt{g_0 l} e^{g_0 l}} \quad (2.51)$$

conocida como fórmula de Linford. Mediante esta fórmula, se puede calcular el coeficiente de ganancia de un plasma midiendo la intensidad emitida por plasmas de diferente longitud.

2.4.3. Régimen de saturación

Para calcular la ganancia 2.47 es necesario calcular las poblaciones de los niveles $N_1 N_2$ de la transición. Siendo A_{ij} los coeficientes de Einstein de emisión espontánea, B_{ij} los de absorción y emisión estimulada, C_{ij} las tasas de excitación y desexcitación colisional, Γ_i un coeficiente que englobe el resto de mecanismos que pueblan el nivel i y γ_i el resto de mecanismos que vacían dicho nivel, para un sistema de tres niveles se pueden escribir las ecuaciones diferenciales que rigen la evolución de la población de los niveles:

$$\begin{aligned} \frac{dN_2}{dt} = & \Gamma_2 - \gamma_2 N_2 - A_{21} N_2 - C_{21} n_e N_2 - \\ & - N_2 \int B_{32}(\nu) \mu(\nu) d\nu + N_1 \int B_{12}(\nu) \mu(\nu) d\nu \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} = & \Gamma_1 + A_{21} N_2 + C_{21} n_e N_2 - A_{10} N_1 + C_{01} n_e N_0 + \\ & + N_2 \int B_{32}(\nu) \mu(\nu) d\nu - N_1 \int B_{12}(\nu) \mu(\nu) d\nu \end{aligned} \quad (2.53)$$

$$N_0 \cong N_{N_e} \quad (2.54)$$

Suponiendo un estado cuasi-estacionario y en régimen de señal débil (la emisión estimulada no afecta a las poblaciones, $\mu \approx 0$ las ecuaciones 2.52, 2.53 pueden resolverse, obteniendo

$$N_2^{ss} = \frac{\Gamma_2}{A_{21} + C_{21} n_e + \gamma_2} \quad (2.55)$$

$$N_1^{ss} = \frac{\tilde{\Gamma}_1}{A_{10}} + \left(1 - \frac{\gamma_2}{K_2}\right) \frac{\Gamma_2}{A_{10}} \quad (2.56)$$

donde $K_2 = A_{21} + C_{21} n_e + \gamma_2$ y $\tilde{\Gamma}_1 = \Gamma_1 + C_{01} n_e N_0$. Teniendo en cuenta la relación $B_{12} = B_{21} g_2 / g_1$ las ecuaciones 2.52 y 2.53 se pueden reescribir como

$$\Gamma_2 - K_2 N_2 = \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1\right) \int B_{21}(\nu) \mu(\nu) d\nu \quad (2.57)$$

$$A_{10} N_1 - \tilde{\Gamma}_1 - (K_2 - \gamma_2) N_2 = \left(N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1\right) \int B_{21}(\nu) \mu(\nu) d\nu \quad (2.58)$$

Tomando como densidad de energía $\mu(\nu)$ únicamente la del haz de rayos X amplificado a lo largo del eje z , se tiene que

$$\mu(\nu) = \frac{I(\nu)}{c}$$

Teniendo en cuenta que el ancho de banda de la radiación amplificada será mucho menor que el de la emisión espontánea y que $B_{21} = \frac{c^3}{8\pi h \nu^3} A_{21}(\nu)$ se obtiene

$$\int B_{21}(\nu) \mu(\nu) d\nu \cong \frac{A_{21}(\nu_0) c^2}{8\pi h \nu_0^3} \int I(\nu) d\nu = \frac{A_{21}(\nu_0) c^2}{8\pi h \nu_0^3} I$$

Con este resultado se puede entrar en las ecuaciones 2.57, 2.58 para obtener

$$N_2 - \frac{g_2}{g_1} N_1 = \frac{\left(N_2^{ss} - \frac{g_2}{g_1} N_1^{ss} \right)}{1 + \frac{\left(A_{10} + \gamma_2 \frac{g_2}{g_1} \right) A_{21}(\nu_0)}{K_2 A_{10}} \frac{I}{8\pi h \nu_0^3}}$$

Así, el coeficiente de ganancia en el pico de la raya se puede escribir como

$$g_0 = \frac{g_0^{ss}}{1 + \frac{I}{I_{sat}}} \quad (2.59)$$

donde la intensidad de saturación se define como la intensidad de radiación exterior que, al interaccionar con el sistema, reduce la inversión de población a la mitad, y vale

$$I_{sat} = \frac{K_2}{1 + \frac{g_2}{g_1} \frac{\gamma_2}{A_{10}}} \frac{8\pi h \nu^3}{A_{21}} \quad (2.60)$$

El término

$$\tau_R = \frac{1 + \frac{g_2}{g_1} \frac{\gamma_2}{A_{10}}}{K_2} \approx \frac{1}{A_{21} + C_{21} n_e + \gamma_2} \quad (2.61)$$

es conocido como el tiempo de restauración de la ganancia (*recovery time*). En general es muy complicado estimar su valor, por lo que de cara a estudiar el régimen de saturación, es más conveniente trabajar usando fluencias (energía

por unidad de área) en lugar de intensidades. Así, el coeficiente de ganancia resulta ser

$$g_0 = \frac{g_0^{ss}}{1 + \frac{F}{F_{sat}}} \quad (2.62)$$

donde F representa la fluencia y F_{sat} la fluencia de saturación, que es igual a la intensidad de saturación multiplicada por el tiempo de restauración de la ganancia:

$$F_{sat} = \frac{h\nu}{\sigma} \quad (2.63)$$

y σ es la sección eficaz de emisión estimulada. Se comprueba que la fluencia de saturación depende únicamente de las propiedades del sistema atómico.

2.4.4. Perfil de la raya

Idealmente, una transición entre dos niveles energéticos, tiene una energía determinada y, por tanto, en dicha transición se emitirán o absorberán fotones de una única longitud de onda bien determinada. Sin embargo, diferentes mecanismos *ensanchan* la línea, siendo ésta ya no una única longitud de onda sino que existirá una función de distribución de las longitudes de onda dependiente del mecanismo que produzca este ensanchamiento. Dentro de los diversos mecanismos responsables, aquí se tendrán en cuenta el ensanchamiento natural, el colisional y el Doppler. Una discusión más elaborada se puede encontrar en [50].

Ensanchamiento natural

Cuando un electrón dentro de un átomo se encuentra en un estado excitado, tiene una probabilidad no nula de decaer al estado fundamental por emisión espontánea. Esta probabilidad se puede relacionar directamente con el coeficiente A de Einstein. Los efectos en la anchura espectral de radiación emitida pueden ser explicados como sigue. El campo radiado por un dipolo oscilante es proporcional a su momento dipolar $\langle \Psi_j | d | \Psi_i \rangle$. Sin embargo, como los dos estados i, j pueden decaer espontáneamente a otros niveles de menor energía, las amplitudes de la función de onda decaerán con tasas iguales a la mitad de su coeficiente A respectivo. El campo eléctrico emitido será

$$E(t) \propto \cos(\omega_{ji}t) \exp \left[-\frac{(A_j + A_i)}{2} t \right] \quad (2.64)$$

2.4. PROPAGACIÓN Y AMPLIFICACIÓN DE RADIACIÓN XUV

. El espectro viene dado por la transformada de Fourier del campo eléctrico. El resultado, usando ciertas aproximaciones, es una distribución normalizada de Lorentz:

$$L(\omega) = \frac{2}{\pi \Delta\omega} \frac{1}{1 + \frac{4(\omega - \omega_{ji})^2}{(\Delta\omega)^2}} \quad (2.65)$$

$$\Delta\omega = \sum_k (A_{jk} + A_{ik}) \quad (2.66)$$

El ensanchamiento natural está presente en todos los espectros de radiación, ya que el tiempo de vida de los niveles excitados es finito. Sin embargo, en los láser de rayos X basados en plasmas a partir de blancos sólidos, el ensanchamiento natural es despreciable en comparación con los dos mecanismos restantes: el ensanchamiento colisional y el Doppler.

Ensanchamiento colisional

Como se ha explicado, el ensanchamiento natural se debe al tiempo finito de vida de los niveles excitados (es decir, existe una probabilidad natural de desexcitación). Sin embargo, existen otros mecanismos que pueden reducir, de una manera similar, el tiempo de vida de un nivel excitado. Uno de ellos, de relativa importancia en plasmas, son las colisiones de electrones con los átomos. De la misma manera que existe una probabilidad de que un nivel excitado decaiga a otro nivel de menor energía, existe otra probabilidad de que un electrón colisione con el átomo, cediendo energía y excitando aún más el nivel responsable de la emisión, o bien perturbándolo de tal manera que decaiga a un estado de menor energía. De cualquier forma, los niveles responsables de la transición dejan de estar poblados debido a las colisiones con electrones. Como es de esperar, el espectro resultante será de nuevo un perfil de Lorentz con un ancho $\Delta\omega$ dado por la suma de todas las tasas de colisión electrónica.

Si tenemos en cuenta que la colisión electrónica es el mecanismo que crea la inversión de población en los láser de rayos X basados en plasma, se llega a la conclusión de que el ensanchamiento colisional será relativamente importante al estudiar el espectro emitido. El tratamiento del ensanchamiento colisional es realmente complicado, pero se pueden obtener estimaciones de su valor a partir de ciertas aplicaciones. En [107], se llega a la conclusión que, en la aproximación de impacto, que es válida cuando el tiempo entre colisiones es mucho mayor que el tiempo que dura una colisión o lo que es lo mismo, sólo se consideran interacciones binarias, el ensanchamiento colisional en unidades de frecuencia angular es dos veces la frecuencia de colisión

electrón-ión:

$$\Delta\omega = 2\pi\Delta\nu = 2\nu_{ei} \quad (2.67)$$

La frecuencia de colisión viene dada por [51]:

$$\nu_{ei} = 2,63 \times 10^{-6} \frac{ZN_e \ln \Lambda}{T_e^{\frac{3}{2}}} \quad (2.68)$$

Así pues, el ensanchamiento colisional da lugar a un perfil de Lorentz con la forma

$$L(\omega) = \frac{2}{\pi\Delta\omega} \frac{1}{1 + \frac{4(\omega-\omega_0)^2}{(\Delta\omega)^2}} \quad (2.69)$$

donde ω_0 es la frecuencia de la línea y $\Delta\omega$ viene dada por 2.67.

Ensanchamiento Doppler

La frecuencia ω de la radiación emitida por una fuente en movimiento depende de la velocidad v , en lo que se conoce como efecto Doppler:

$$\omega = \omega_0 \left(1 + \frac{v}{c}\right) \quad (2.70)$$

Así pues, en un plasma donde los iones tienen diferentes velocidades, para una línea espectral bien definida ω_0 se emitirá un espectro de frecuencias ω debido al movimiento de los diferentes iones emisores. Este espectro dependerá de la función de distribución de velocidades de los iones. En equilibrio termodinámico, la función de distribución de velocidades es una distribución de Maxwell

$$f(v) = \left[\frac{m}{2\pi kT}\right]^{3/2} \exp\left[\frac{-mv^2}{2kT}\right] \quad (2.71)$$

Calculando la función de correlación y realizando su transformada de Fourier se obtiene el espectro de la línea debido al ensanchamiento Doppler:

$$L(\omega) = \frac{c}{\omega_0} \left[\frac{m}{2\pi kT}\right]^{1/2} \exp\left[\frac{-mc^2(\omega - \omega_0)^2}{2kT\omega_0^2}\right] \quad (2.72)$$

Debido a las temperaturas necesarias para alcanzar los estados de ionización neonoides y niqueloides en los láser X basados en plasmas, el efecto Doppler es el principal mecanismo de ensanchamiento de las líneas de emisión.

El perfil de Voigt

Como se ha explicado en los apartados anteriores, las líneas de emisión en los amplificadores de radiación X basados en plasmas se ensanchan principalmente debido a las colisiones con electrones y al efecto Doppler. El ensanchamiento colisional (u homogéneo) da lugar a una función de distribución de Lorentz, mientras que el ensanchamiento Doppler da lugar a una distribución gaussiana. Si sólo predominara uno de los dos mecanismos, el perfil de línea observado sería precisamente uno de esos dos. Sin embargo, cuando ambos procesos están presentes (aunque el Doppler predomine) el perfil resultante es la convolución de ambos:

$$V(\nu) = \int_0^\infty S(u)\phi(\nu - u)du \quad (2.73)$$

donde $S(u)$ es el perfil Doppler y $\phi(\nu_0, u)$ el de Lorentz. El perfil resultante $V(\nu)$ se conoce como perfil de Voigt. Existen aproximaciones para calcular el valor pico y el ancho del perfil a partir de las distribuciones de Gauss y Lorentz que forman dicho perfil.

La ganancia de pequeña señal depende directamente de la forma de la línea, como se refleja en la ecuación 2.47. Como se ha explicado, este perfil será, de manera general, un perfil de Voigt, por lo que el coeficiente de ganancia tomará la forma más general [50]:

$$g(\nu) = \frac{g_0}{V(\nu_0)} \int_0^\infty \frac{S(u)\phi(\nu - u)du}{1 + \frac{1}{I_{sat}} \int_0^\infty I(\nu')\phi(\nu' - u)d\nu'} \quad (2.74)$$

Así pues, un cálculo detallado de las líneas da como resultado un perfil de Voigt que habrá que tener en cuenta a la hora de calcular la ganancia. Sin embargo, en ciertos casos puede dominar una fuente de ensanchamiento sobre otra y puede ser correcto tomar como perfil de la raya, el perfil correspondiente sin convolucionar para simplificar los cálculos.

Influencia del perfil de la raya

El ensanchamiento de la línea debido a los diferentes mecanismos explicados anteriormente tiene un gran impacto en la amplificación resultante, debido a su acoplamiento con la ganancia a través de la ecuación 2.74. Un perfil más ancho extiende la ganancia alrededor de la línea a costa de reducir el valor de la ganancia en el centro de la línea $g(\nu_0)$. El control del ancho de la línea a amplificar es crucial de cara a mejorar las propiedades del haz, ya que, bajo ciertas condiciones y debido a las propiedades de la transformada de Fourier, la duración temporal del pulso es inversamente proporcional

al ancho de la línea. Así pues, si de alguna manera se logra compensar la reducción de ganancia en el centro de la línea, puede ser beneficioso un ensanchamiento de ésta ya que la duración del pulso disminuirá y la intensidad de éste aumentará en consecuencia.

En [107] se ha usado la aproximación de impacto, anteriormente indicada, para estudiar el impacto del ensanchamiento colisional en la amplificación de pulsos, tanto en régimen ASE como en inyección. En primer lugar se estudió el experimento realizado por Koch *et al* [50]. En él se midió el ensanchamiento de la línea al atravesar diferentes longitudes de plasma. En la figura 2.9 se observa que el ensanchamiento se ajusta bien a la teoría cuando se toman como ensanchamiento Doppler 36 mÅ y como ensanchamiento colisional 14 mÅ. Sin embargo, estos valores dan lugar a una estimación más bien baja del ensanchamiento intrínseco, calculado al extrapolar la curva hasta 0 cm. El uso de un valor de 23.5 mÅ, calculado con la aproximación de impacto, también se ajusta bien a los resultados experimentales mientras que, ahora si, el ensanchamiento intrínseco concuerda con el experimental.

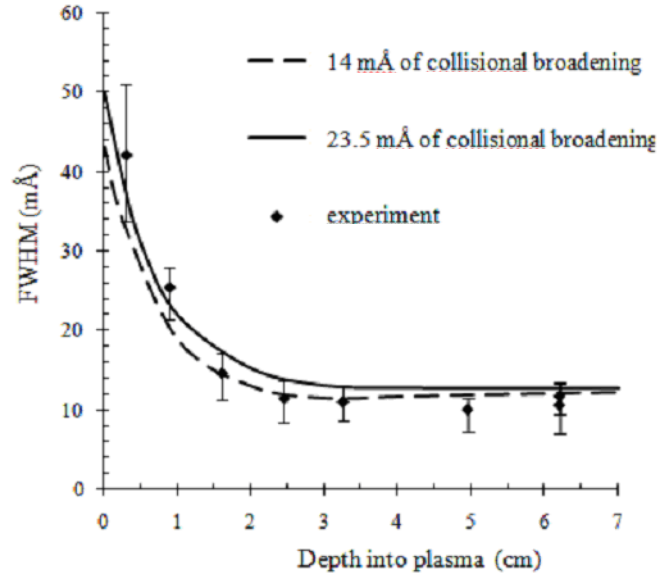


Figura 2.9: FWHM en función de la distancia en las condiciones dadas en [50] y 36 mÅ de ensanchamiento Doppler. En puntos se dan los valores medidos experimentalmente, en línea discontinua los valores estimados en [50] con 14 mÅ de ensanchamiento colisional y en línea continua los valores predichos con 23.5 mÅ de ensanchamiento colisional, calculados con la aproximación de impacto. Figura obtenida de [107].

2.4. PROPAGACIÓN Y AMPLIFICACIÓN DE RADIACIÓN XUV

Así mismo, el trabajo de Koch *et al* se ha usado para para compararlo con predicciones usando el esquema de inyección y condiciones que optimicen el ensanchamiento colisional. Como se ha explicado, el ensanchamiento de la línea trae aparejado una disminución de la ganancia en el centro de la línea. Este efecto de reducción de ganancia puede compensarse en el esquema de inyección si la semilla tiene suficiente intensidad. En la figura 2.10.A se muestra la intensidad calculada para distintos niveles de inyección y condiciones del plasma con la obtenida en [50] (en línea continua roja). En la figura 2.10.B se comparan los anchos de línea en los mismos casos. Una estimación de la duración del pulso se indica también en dicha figura.

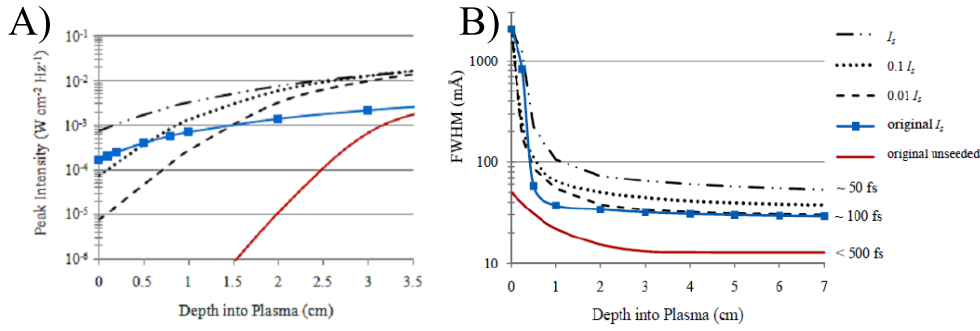


Figura 2.10: Intensidades en el centro de la línea (A) y ensanchamiento de la línea (B) obtenidas en [50] (línea roja), inyectando fuertemente ($I_{seed} = I_{sat}$) en el mismo plasma (línea azul) y variando la inyección en un plasma con el doble de densidad y la mitad de temperatura electrónica (resto de líneas). La duración estimada del pulso se muestra en B. Figura obtenida de [107].

De estas figuras se llega rapidamente a la conclusión de que, en las mismas condiciones (líneas continuas), una fuerte inyección (igual al la intensidad de saturación) permite obtener la misma intensidad que sin inyectar pero un pulso mucho más corto temporalmente. Las líneas discontinuas son los resultados obtenidos si se inyecta en un plasma con una densidad electrónica dos veces mayor y la mitad de la temperatura electrónica alcanzada en [50]. Incluso inyectando débilmente (una centésima parte de la intensidad de saturación) se obtienen intensidades superiores y la duración del pulso se reduce considerablemente, prediciendo pulsos de $\approx 50 fs$ para inyección fuerte.

En conclusión, los mecanismos de ensanchamiento juegan un papel fundamental en la amplificación de pulsos láser. Estos mecanismos pueden permitir la obtención de pulsos muy cortos, a cambio de reducir la ganancia en el centro de la línea. Inyectando armónicos de alto orden fuertemente en el plasma permite superar este problema, de tal manera que se podrían alcanzar intensidades ultra-altas en estos pulsos (del orden de $10^{19} W cm^{-2}$) [107].

2.5. Amplificación de armónicos de alto orden

El estudio de la sección anterior puede aplicarse, con ligeras modificaciones, a la inyección de armónicos de alto orden. El haz de armónicos inyectado en el plasma seguirá sufriendo la misma refracción que en el caso del haz resultante de la emisión espontánea, por lo que la fórmula 2.44 seguirá siendo válida. La ecuación que rige la intensidad del haz amplificado al atravesar una longitud determinada del plasma (ecuación 2.49) se modifica añadiendo simplemente una condición inicial, correspondiente al haz inyectado:

$$\begin{aligned} I(\nu, L) &= \frac{j(\nu)}{g(\nu)} \left(e^{g(\nu) \cdot L} - 1 \right) + I(\nu, 0) e^{g(\nu) \cdot L} \\ &= S(\nu) \cdot \left(e^{g(\nu) \cdot L} - 1 \right) + I(\nu, 0) e^{g(\nu) \cdot L} \end{aligned} \quad (2.75)$$

donde $S(\nu)$ es el término fuente e $I(\nu, 0)$ es la intensidad en $z = 0$. Esta intensidad es nula en el esquema de Amplificación de la Emisión Espontánea (ASE), sin embargo, ese término es de vital importancia en el esquema de inyección de armónicos, ya que representa la energía inyectada que se amplificará. De hecho, esta fórmula nos permite comprender, al menos cualitativamente, los resultados obtenidos en [21] y [110]. En el primer caso, la inyección era débil y se tiene $I(\nu, 0) \approx j(\nu)$, es decir, en el haz amplificado existen contribuciones tanto de la emisión espontánea como de la amplificación de los armónicos inyectados, sin que predomine ninguna contribución. Por otro lado, en [110] se inyecta fuertemente, de tal manera que $I(\nu, 0) \gg j(\nu)$ y la amplificación de los armónicos predominó sobre la amplificación de la emisión espontánea, obteniendo un haz altamente energético, coherente y focalizable.

El perfil de la raya y de la radiación amplificada juegan un papel fundamental en la inyección de armónicos, no solo debido al gran potencial que tiene el control de éste perfil de cara a producir pulsos ultra-cortos, sino también a la gran diferencia entre el ancho de banda del plasma amplificador (típicamente $\Delta\lambda/\lambda \cdot 10^{-5}$) y la anchura espectral de los armónicos, que puede ser dos órdenes de magnitud superior. Debido a este efecto, gran parte de la energía del haz inyectado no se amplificará ya que su frecuencia será mayor o menor que la que se puede amplificar. Las implicaciones de esta diferencia se discutirán en capítulos posteriores, indicando la necesidad del uso de varias etapas amplificadoras para facilitar el acoplamiento entre armónicos y plasma amplificador.

2.6. Conclusiones

En este capítulo se ha estudiado la física de los amplificadores de radiación X basados en plasmas. En el modelizado de estos sistemas se han de tener en cuenta multitud de procesos físicos: evolución de los plasmas creados por láseres, interacción de la radiación láser y el plasma, física atómica y cinética de poblaciones, propagación de la radiación y su interacción con el medio amplificador, etc ...

La física básica de estos procesos ha sido expuesta, indicando las aproximaciones e hipótesis realizadas y los métodos usados en su estudio. Esto es necesario para comprender los límites de validez de los métodos computacionales que se explicarán en los siguientes capítulos y proponer mejoras de dichos métodos. Así mismo, un conocimiento de la física básica de los amplificadores permitirá comprender los resultados obtenidos y avanzar en la optimización de estos dispositivos.

Capítulo 3

El código ARWEN

3.1. Introducción

En los capítulos anteriores se ha descrito la física de los amplificadores de radiación X blanda coherente basados en plasmas. Un correcto diseño y optimización de dichos amplificadores requiere un cuidadoso estudio teórico que ahorre tiempo y costos de laboratorio. Para ello es necesario resolver las ecuaciones que rigen la evolución del plasma, el campo de radiación, los distintos parámetros atómicos relacionados con la creación de la inversión de población (necesaria para crear el efecto láser) y la amplificación y propagación del haz láser.

En éste capítulo se describirá en detalle el código ARWEN, tanto las ecuaciones y los métodos numéricos usados para resolverlas, como las innovaciones introducidas en el marco de esta tesis. Estas mejoras han permitido usar este código para estudiar la evolución hidrodinámica del plasma amplificador. Los datos obtenidos con este código son posteriormente postprocesados para obtener los datos atómicos y del haz amplificado, como se explicará en capítulos posteriores.

3.2. El código ARWEN

ARWEN es un código hidrodinámico bidimensional (2D) con transporte de radiación [64] desarrollado en el *Instituto de Fusión Nuclear* de la Universidad Politécnica de Madrid. Éste código ha sido usado en diversos campos como la Fusión por Confinamiento Inercial (*Inertial Confinement Fusion* ICF) [102], Astrofísica de Laboratorio [100] y Láseres de Rayos X Blandos basados en Plasmas [14, 65, 68]. ARWEN resuelve las ecuaciones de la hidrodinámica

acoplada con radiación y conducción térmica

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla (P_m + P_r) \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial \rho E_m}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho E_m \mathbf{u} + (\mathbf{P}_m + \mathbf{P}_r) \mathbf{u}] = S_E + \nabla \cdot \mathbf{q}_c + \nabla \cdot \mathbf{q}_r \quad (3.3)$$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial I}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \mathbf{I} + \kappa \cdot \mathbf{I} = \epsilon \quad (3.4)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_c = -\nabla \cdot k_e \nabla T \quad (3.5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{q}_r = \int (\kappa \cdot \mathbf{I} - \epsilon) d\nu \quad (3.6)$$

$$E_r = \frac{1}{c} \int I d\boldsymbol{\Omega} d\nu \quad (3.7)$$

$$P_r = \frac{1}{3} E_r \quad (3.8)$$

dond ρ es la densidad, \mathbf{u} el vector velocidad, P_m y P_r son los tensores de presión de la materia y de la radiación, E_m la energía de la materia, S_E engloba las diversas fuentes de energía (como puede ser un haz laser enfocado en el plasma, reacciones químicas, etc ...), \mathbf{q}_c y \mathbf{q}_r son los flujos de calor de conducción térmica y radiación, c es la velocidad de la luz, I es la intensidad de radiación, $\boldsymbol{\Omega}$ el ángulo sólido, κ y ϵ son la opacidad y la emisividad del medio respectivamente, k_e la conductividad térmica, ν es la frecuencia de la radiación y E_r es la energía del campo de radiación.

Debido a la complejidad de resolución de las anteriores ecuaciones, se utiliza el método de división de operadores (*Operator Splitting*) para resolver el sistema. Este método consiste en la separación de los tres principales fenómenos físicos de transmisión de energía: convección, conducción y radiación. Como se indica en la figura 3.1, en primer lugar se resuelven las ecuaciones de fluidos 3.1, 3.2, 3.3, correspondientes a la convección del fluido. En segundo lugar se resuelve la conducción térmica (ecuación 3.5) y por último el transporte de radiación (ecuaciones 3.4, 3.6). Estas ecuaciones requieren diferentes técnicas de resolución que serán explicadas en las siguientes secciones.

A pesar de usar métodos completamente diferentes en los módulos en los que se han subdividido las ecuaciones a resolver, todos ellos se basan en la técnica conocida como Malla Adaptativa Refinada (*Adaptive Mesh Refinement* AMR) [8, 81]. El fundamento del método AMR se basa en concentrar el esfuerzo de cálculo en zonas donde es necesaria una mayor resolución, de tal manera que se obtenga un error homogéneo en todo el dominio de computación. En el caso del código ARWEN, esto se consigue refinando localmente

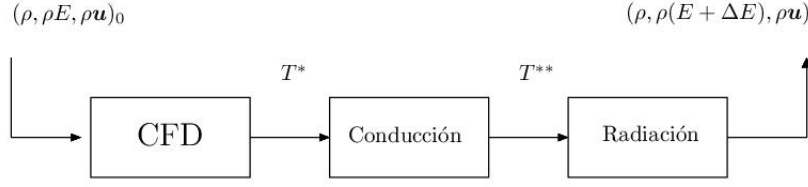


Figura 3.1: Diagrama de flujo del código ARWEN.

la malla en zonas donde se necesita una mayor resolución usando una malla más gruesa en el resto del dominio.

Este método puede ser absolutamente necesario en ciertas simulaciones donde aparezcan regiones de alta complejidad y reducido tamaño que afecten al resto del sistema de una manera importante. Ejemplos de este tipo son ondas de choque y detonación o casos en astrofísica de interacción de sistemas distantes, donde existen grandes diferencias de escalas. El mantener una malla lo suficientemente refinada en todo el sistema daría lugar a costos computacionales que harían imposible la simulación en tiempos aceptables.

En las siguientes secciones se explicarán por separado los distintos módulos que forman el código ARWEN, indicando explícitamente las mejoras introducidas en ellos en el marco de esta tesis.

3.3. Resolución de las ecuaciones de fluidos

Las ecuaciones de fluidos representan la conservación de ciertas variables de un sistema, en este caso la masa, cantidad de movimiento y energía. Estas ecuaciones, en su forma más general y sin tener en cuenta efectos relativistas, se conocen con el nombre de *ecuaciones de Navier-Stokes*

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u} - \tau) + \nabla \mathbf{p}_m = \rho \mathbf{f}_m \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \rho E_m}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho E_m \mathbf{u} + \mathbf{p}_m \mathbf{u} - \tau \cdot \mathbf{u}] = S_E + \nabla \cdot \mathbf{q}_c \quad (3.11)$$

donde se ha usado la siguiente notación:

$$\begin{aligned} \rho &: \text{Densidad} \\ \mathbf{u} &: \text{Velocidad} \\ p_m &: \text{Presión del fluido} \end{aligned}$$

- τ : *Tensor de esfuerzos viscosos*
- \mathbf{f}_m : *Vector de fuerzas másicas*
- E_m : *Energía interna total del fluido*
- \mathbf{q}_c : *Flujo de energía por conducción*
- S_E : *Otras fuentes y/o sumideros de energía*

Estas ecuaciones necesitan una relación adicional entre variables, conocida como ecuación de estado (EOS) y una definición del tensor de esfuerzos para poder ser resueltas. La ecuación de estado nos relacionará las diferentes variables termodinámicas a partir de dos de ellas, por ejemplo $p_m = p_m(\rho, T)$ y $e_m = e_m(\rho, T)$ donde e_m es la energía interna del fluido. El tensor de esfuerzos viscosos se puede expresar, para fluidos newtonianos, en función de la viscosidad μ del fluido:

$$\tau_{ij} = \mu \left[\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \delta_{ij} (\nabla \cdot \mathbf{u}) \right] \quad (3.12)$$

La resolución de las ecuaciones de Navier-Stokes presenta serias dificultades, empezando por la demostración de la existencia y unicidad de sus soluciones [25], por lo que, dependiendo del problema, se suelen realizar ciertas simplificaciones despreciando términos de las ecuaciones. La importancia relativa de los distintos términos de las ecuaciones se mide con una serie de números adimensionales, resultantes de la adimensionalización de las ecuaciones. En el caso a estudiar, los dos números resultantes que tienen en cuenta la física fundamental de nuestro problema son el número de Reynolds $Re = \frac{\rho u L}{\mu}$, que relaciona las fuerzas de inercia y viscosas, y el Número de Prandtl $Pr = \frac{c_p \mu}{\kappa}$, que relaciona la viscosidad (difusión de momento) y la conductividad (difusión de energía térmica). c_p es el calor específico del fluido y L una longitud característica del sistema. En los casos de interés para este trabajo, las velocidades del fluido son muy altas, por lo que el número de Reynolds será elevado y se podrán despreciar los efectos de la viscosidad (es decir, el tensor de esfuerzos). No ocurre lo mismo con la conductividad térmica, ya que ésta no podrá despreciarse. Sin embargo, y debido a la estructura del código ARWEN, los efectos de conducción se tienen en cuenta en otro módulo, por lo que a la hora de resolver las ecuaciones de fluidos se desprecia también el término de conducción. Con estas dos simplificaciones, todas las derivadas de segundo orden han desaparecido de las ecuaciones, quedando un sistema de ecuaciones en derivadas parciales de primer orden más sencillo que el original. Este nuevo sistema de ecuaciones es conocido

como *ecuaciones de Euler*, que en forma matricial son:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho \mathbf{u} \\ \rho E \end{pmatrix} + \nabla \cdot \begin{pmatrix} \rho \mathbf{u} \\ \rho \mathbf{u} \mathbf{u} + \mathbf{p} \\ \rho \mathbf{u} (\mathbf{E} + \mathbf{p}/\rho) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

donde se han despreciado las fuerzas másicas y la fuente de energía (ya que esta se tratará en la ecuación de conducción). Las ecuaciones de Euler son un sistema de ecuaciones de conservación (expresan la conservación de masa, momento y energía) hiperbólicas no lineales.

3.3.1. Resolución numérica: el método de Godunov

Las ecuaciones de Euler, debido a su no linealidad, pueden desarrollar discontinuidades en sus soluciones, como son las ondas de choque, lo cual requiere métodos especiales que capturen y resuelvan adecuadamente estas discontinuidades. El teorema de Lax-Wendroff establece que una clase de métodos numéricos, de la forma:

$$\mathbf{u}_i^{n+1} = \mathbf{u}_i^n + \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{f}_{i-\frac{1}{2}} - \mathbf{f}_{i+\frac{1}{2}}] \quad (3.14)$$

$$f_{i+\frac{1}{2}} = f_{i+\frac{1}{2}}(\mathbf{u}_{i-L}^n, \dots, \mathbf{u}_{i+L}^n) \quad (3.15)$$

llamados *métodos conservativos*, si convergen, necesariamente convergen a una solución débil de la ley de conservación. \mathbf{u}_i^n representa el valor medio de la variable $u(x, t)$ en la celda i en el paso temporal n :

$$u_i^n = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_i-\frac{1}{2}}^{x_i+\frac{1}{2}} u(x, n\Delta t) dx \quad (3.16)$$

Las cantidades $f_{i+\frac{1}{2}}$ son los llamados flujos numéricos, que representan una aproximación numérica de los flujos físicos de la ley de conservación. Esta aproximación ha de ser *consistente*, es decir, si todos los argumentos del flujo 3.15 son iguales a v , entonces el flujo numérico ha de ser igual al flujo físico para v :

$$f_{i+\frac{1}{2}}(v, \dots, v) = f(v) \quad (3.17)$$

Con estas definiciones y condiciones, para calcular el valor medio de una cantidad en el dominio de cálculo sólo necesitamos especificar la forma del flujo numérico 3.15 que cumpla la condición de consistencia 3.17. Diferentes flujos numéricos dan lugar a diferentes esquemas, algunos de ellos inestables.

Por ejemplo, y particularizando para la ecuación lineal de advección con velocidad a :

$$u_t + au_x = 0 \quad (3.18)$$

la elección del flujo

$$f_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} au_i & \text{si } a > 0 \\ au_{i+1} & \text{si } a < 0 \end{cases} \quad (3.19)$$

da lugar al conocido esquema *upwind* de primer orden, mientras que el flujo

$$f_{i+\frac{1}{2}} = a \frac{u_i + u_{i+1}}{2} \quad (3.20)$$

da lugar a un esquema centrado que resulta ser inestable.

El flujo usado en el método de Godunov es:

$$f_{i+\frac{1}{2}}^{god} = f(u_{i+\frac{1}{2}}(0)) \quad (3.21)$$

donde $u_{i+\frac{1}{2}}(0)$ denota la solución del problema de Riemann definido por las celdas $i, i+1$; es decir, la solución del sistema de ecuaciones a resolver (en nuestro caso las ecuaciones de Euler 3.13) con condiciones iniciales

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{u}_i & \text{si } x < 0 \\ \mathbf{u}_{i+1} & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (3.22)$$

Así pues, la resolución del sistema de ecuaciones original 3.13 se ha reducido a aproximar la solución por sus valores medios en las celdas de una malla en la que se ha dividido el dominio y a actualizar sus valores con el tiempo a través de una aproximación de los flujos físicos, obtenida resolviendo un problema de Riemann en cada interfaz entre celdas. La exactitud del método y el costo computacional dependerán de la manera en que definamos las condiciones iniciales del problema de Riemann y de la exactitud de su resolución, lo cual se tratará en los siguientes apartados.

El problema de Riemann para las ecuaciones de Euler

El problema de Riemann para las ecuaciones de Euler consiste en resolver las ecuaciones 3.13 con las condiciones iniciales

$$\mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x = 0 \quad (3.23)$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{U}^0(\mathbf{x}) \begin{cases} \mathbf{U}_L & \text{si } x < 0 \\ \mathbf{U}_R & \text{si } x > 0 \end{cases} \quad (3.24)$$

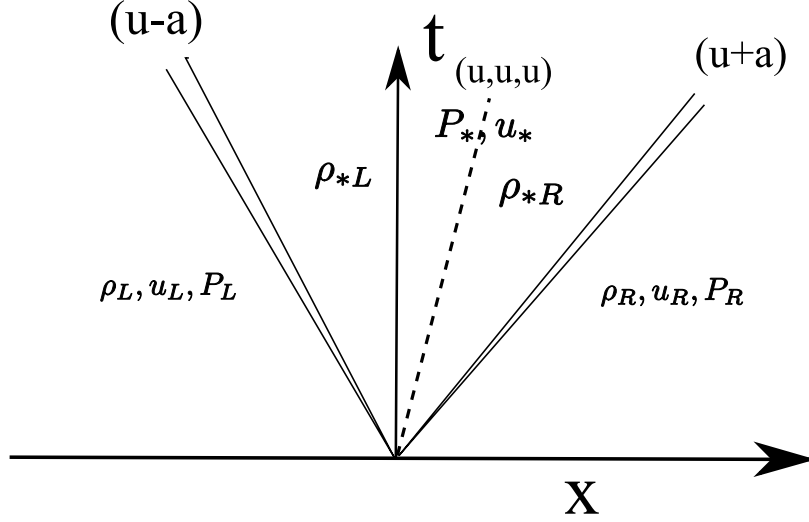


Figura 3.2: Estructura de la solución del problema de Riemann en el plano x - t .

donde $\mathbf{U} = (\rho, \rho \mathbf{u}, \rho \mathbf{E})$ es el vector de variables conservadas. También es útil definir el vector de variables primitivas $\mathbf{W} = (\rho, \mathbf{u}, \mathbf{p})$. El dominio en el plano x - t son los puntos $-\infty < x < \infty$ y $t > 0$.

La solución exacta del problema de Riemann (ver por ejemplo [99]) en el caso unidimensional consta de tres ondas, que dividen el espacio x - t en cuatro regiones, asociadas a los valores propios de la matriz del sistema: $\lambda_1 = u - a, \lambda_2 = u, \lambda_3 = u + a$ donde a es la velocidad del sonido y u la velocidad del fluido. Con cada uno de estos valores propios está asociada una posible solución elemental del problema de Riemann:

■ Onda de Choque

Una onda de choque conecta dos estados $\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R$ a través de una discontinuidad de salto, a través de la cual se aplican las siguientes condiciones:

- Condición de Rankine-Hugoniot:
 $\mathbf{F}(\mathbf{U}_R) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_L) = \mathbf{S}_i(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)$; donde S_i es la velocidad de la discontinuidad.
- Condición entrópica:
 $\lambda(\mathbf{U}_L) > \mathbf{S}_i > \lambda(\mathbf{U}_R)$; donde λ es el valor propio correspondiente a esta onda.

■ Onda de Rarefacción

Una onda de rarefacción conecta los dos estados $\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R$ a través de una transición suave y continua, aplicando las siguientes condiciones:

- Constancia de los Invariantes de Riemann Generalizados a través de la onda
- Divergencia de las características:
 $\lambda(\mathbf{U}_L) < \lambda(\mathbf{U}_R)$

■ Contacto

Un contacto conecta los estados $\mathbf{U}_L, \mathbf{U}_R$ a través de una discontinuidad de salto en la velocidad, aplicando las condiciones:

- Rankine-Hugoniot
- Constancia de los Invariantes de Riemann Generalizados
- Las características son paralelas
 $\lambda(\mathbf{U}_L) = \lambda(\mathbf{U}_R) = \mathbf{S}_i$

Los estados $\mathbf{W}_{*L}, \mathbf{W}_{*R}$ separados entre si por una discontinuidad de contacto correspondiente al valor propio λ_2 y de los estados iniciales por las ondas correspondientes a los valores propios $\lambda_{1,3}$, que pueden ser ondas de choque o de rarefacción, son la incógnita del problema.

No existe ninguna solución exacta cerrada para el problema de Riemann de las ecuaciones de Euler, ni siquiera para gases ideales. La estrategia de resolución consiste en aprovechar las propiedades de la velocidad y presión en la región estrella para obtener una ecuación algebraica no lineal que, una vez resuelta iterativamente, nos da el valor de la presión en dicha región y, a partir de dicho valor, calcular el resto de variables.

En el método de Godunov es necesario resolver un problema de Riemann por cada frontera de celda y por cada paso de tiempo, por lo que la resolución iterativa del problema de Riemann es excesivamente costosa. Además, una precisión elevada en su resolución no es necesaria ya que se introducen errores en otras partes del código, por lo que en la práctica se suelen usar métodos aproximados de resolución del problema, como los solvers basados en las variables primitivas [99].

Método de Godunov de alto orden

El método de Godunov tal y como se ha presentado es un método de primer orden, por lo que sería deseable obtener mayor exactitud. Sin embargo, como se ha explicado, la resolución exacta del problema de Riemann no solo es muy costosa computacionalmente, sino que además no tiene por

qué mejorar sensiblemente la exactitud del método. Van Leer introdujo la idea de modificar las condiciones iniciales del problema de Riemann, usando en lugar de los valores medios en celda, valores extrapolados.

Esta reconstrucción de nuevo asume que los valores u_i^n representan una media de la cantidad u en la celda i , pero, en lugar de suponer que la cantidad es constante en cada celda, ésta se aproxima por una función lineal a trozos. La reconstrucción es de la forma

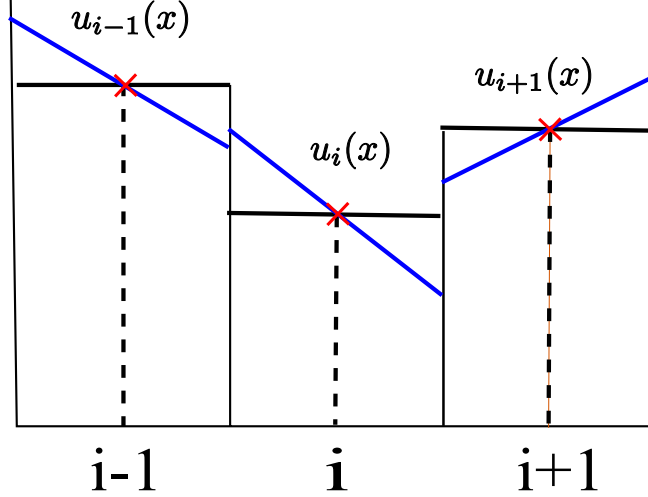


Figura 3.3: Reconstrucción lineal a trozos (en azul) de la función $u(x)$ en tres celdas consecutivas.

$$u_i(x) = u_i^n + \frac{x - x_i}{\Delta x} \Delta_i \quad (3.25)$$

donde $\frac{\Delta_i}{\Delta x}$ es una pendiente elegida para cada celda, de la forma

$$\Delta_i = \frac{1}{2}(1 + \omega)\Delta u_{i-\frac{1}{2}} + \frac{1}{2}(1 - \omega)\Delta u_{i+\frac{1}{2}} \quad (3.26)$$

con $\Delta u_{i+\frac{1}{2}} = u_{i+1}^n - u_i^n$. ω puede tomar valores entre 0 y 1. Los valores de $u_i(x)$ en los extremos de la celda, llamados valores de contorno extrapolados, tienen gran importancia ya que se usaran para definir el problema de Riemann a resolver:

$$u_i^L = u_i(0) = u_i^n - \frac{1}{2}\Delta_i \quad (3.27)$$

$$u_i^R = u_i(\Delta x) = u_i^n + \frac{1}{2}\Delta_i \quad (3.28)$$

La elección de la pendiente y la construcción del problema de Riemann, diferencian los métodos de alto orden. Ejemplos son el *Piece-Wise Linear Method* (PLM, [99]) y el *Piece-Wise Parabolic Method* de Collella [17].

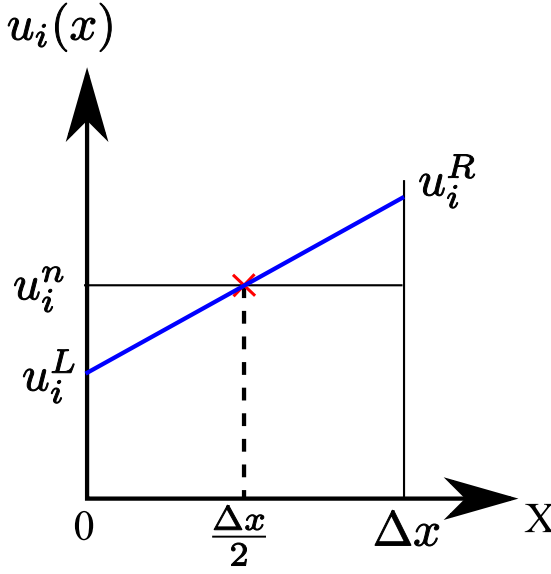


Figura 3.4: Valor medio de la función en la celda u_i^n y valores extrapolados a la izquierda u_i^L y a la derecha u_i^R .

3.4. Resolución de la ecuación de conducción térmica

El segundo módulo del código ARWEN se encarga de resolver la conducción térmica en el plasma, que redistribuirá la energía interna en las diferentes regiones del sistema. Las fuentes externas de energía, como pueden ser los láseres, se tienen en cuenta en este módulo. La ecuación a resolver es la de transmisión de calor

$$\rho C_v \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (\kappa_e \nabla T) + S_E \quad (3.29)$$

donde ρ es la densidad, T la temperatura, C_v el calor específico a volumen constante, κ la conductividad y S_E las fuentes externas de energía, en nuestro caso, la energía depositada por el láser.

Estas ecuaciones se discretizan usando diferencias finitas y un método implícito temporal, obteniendo

$$\rho C_v T^1 - \Delta t \nabla (\kappa_e \nabla T^1) = \rho C_v T^0 + \Delta t S_E \quad (3.30)$$

La discretización espacial se realiza también con diferencias finitas, usando un *stencil* de 5 puntos.

$$\begin{aligned} \nabla \left(\kappa_e \nabla T^1 \right) |_{i,j} &= \kappa_{i+\frac{1}{2}} \frac{T_{i+1} - T_i}{\Delta x^2} - \kappa_{i-\frac{1}{2}} \frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x^2} + \\ &+ \kappa_{j+\frac{1}{2}} \frac{T_{j+1} - T_j}{\Delta y^2} - \kappa_{j-\frac{1}{2}} \frac{T_j - T_{j-1}}{\Delta y^2} \end{aligned} \quad (3.31)$$

Las conductividades en borde de celda se calculan a partir de las conductividades en centro de celda (ya que es donde se conocen las cantidades físicas como densidad, temperatura, etc ...) haciendo una media armónica:

$$\kappa_{i+\frac{1}{2}} = 2 \frac{\kappa_{i+1} \cdot \kappa_i}{\kappa_{i+1} + \kappa_i} \quad (3.32)$$

La conductividad κ_i se calcula a partir de las propiedades físicas en la celda, usando expresiones analíticas ajustadas experimentalmente. Una vez discretizado, se construye la matriz del sistema que es invertida con métodos numéricos estándar.

Un problema adicional en la resolución de estas ecuaciones es que el flujo de calor puede tomar valores arbitrariamente grandes ante gradientes de temperatura suficientemente elevados. Sin embargo, la teoría física de plasmas da un valor máximo al flujo de calor debido a electrones, en base a consideraciones cinéticas:

$$|\mathbf{q}_e| < \mathbf{f} \cdot \mathbf{u}_{th} \cdot \mathbf{n}_e \cdot \kappa \mathbf{T}_e \quad (3.33)$$

$$u_{th} = \sqrt{\kappa T_e / m_e} \quad (3.34)$$

Para tener en cuenta esta limitación, se introduce en el cálculo de las conductividades un *limitador de flujo* que evitará la aparición de flujos de calor mayores que el máximo teórico.

3.5. Resolución de la ecuación de transporte de radiación

El tercer módulo en los que se dividen los cálculos realizados por ARWEN se encarga de la transmisión de energía por radiación. Toda materia con temperatura superior al cero absoluto emite radiación electromagnética, perdiendo energía. Esta radiación puede ser a su vez absorbida por otros átomos, con lo que la energía del sistema se redistribuye entre las diferentes partes. En sistemas donde haya zonas a muy alta temperatura (lo cual se da frecuentemente en plasmas), el transporte de energía por radiación juega un papel fundamental en la dinámica del sistema. La ecuación de transporte de

radiación se puede obtener realizando un balance fotónico sobre un volumen fluido de radiación [78], resultando

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial I(\nu, \boldsymbol{\Omega})}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \mathbf{I}(\nu, \boldsymbol{\Omega}) &= \mathbf{S}(\nu) - \kappa(\nu) \mathbf{I}(\nu, \boldsymbol{\Omega}) \\ &+ \int \frac{\nu}{\nu'} \sigma_s(\nu' \rightarrow \nu, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \mathbf{I}(\nu', \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \\ &- \int \sigma_s(\nu \rightarrow \nu', \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}') \mathbf{I}(\nu, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}' \end{aligned} \quad (3.35)$$

donde I es la intensidad de radiación, c la velocidad de la luz, $\boldsymbol{\Omega}$ el ángulo sólido, ν la frecuencia, \mathbf{S} el término fuente y κ el coeficiente macroscópico de absorción. Los dos últimos términos de la ecuación representan la dispersión de la radiación en la materia.

La resolución de la ecuación del transporte es muy costosa computacionalmente, por lo que sería deseable encontrar aproximaciones de resolución más sencilla. Estas aproximaciones se obtienen tomando momentos de la ecuación del transporte [33, 63]. Así se obtiene la conocida aproximación de difusión, donde el campo de radiación es isótropo, o el método M_1 , donde existe una dirección privilegiada [33]. Dependiendo de las características del problema, será aceptable o no el uso de estas aproximaciones. Por ejemplo, en medios con fuertes opacidades, la materia y la radiación se encuentran acopladas fuertemente y el recorrido libre medio de los fotones es despreciable frente a alguna longitud característica del sistema. En estos casos, la aproximación de difusión es aceptable. Cuando esto no es así, el método de difusión deja de ser válido, dando resultados muy diferentes a la resolución completa de la ecuación del transporte, siendo necesario entonces utilizar modelos más avanzados [32].

En la figura 3.5 se muestra una comparación entre transporte, M_1 y difusión, simulando lo que se conoce como test de Mordant. Este test consiste en un medio absorbente, de forma cuadrada, rodeado de un medio dispersivo también cuadrado. En las figuras solo se muestra el cuadrante superior. Los datos numéricos se pueden obtener de la bibliografía [32]. Como solución de referencia se resolvió la ecuación del transporte con un método S_{32} (figura 3.5.a) y ésta se compara con la ecuación del transporte con menor resolución S_8 (figura 3.5.b), el método M_1 (figura 3.5.c) y difusión (figura 3.5.d). Se observa claramente que el método de difusión es incapaz de resolver la estructura que aparece en la esquina del medio absorbente, mientras que el método M_1 da mejores resultados en esta zona. Si se necesita exactitud en dicha zona es necesario resolver la ecuación del transporte de radiación.

El código ARWEN resuelve la ecuación de transporte de radiación, por lo que puede resolver problemas donde el campo de radiación es muy anisótropo.

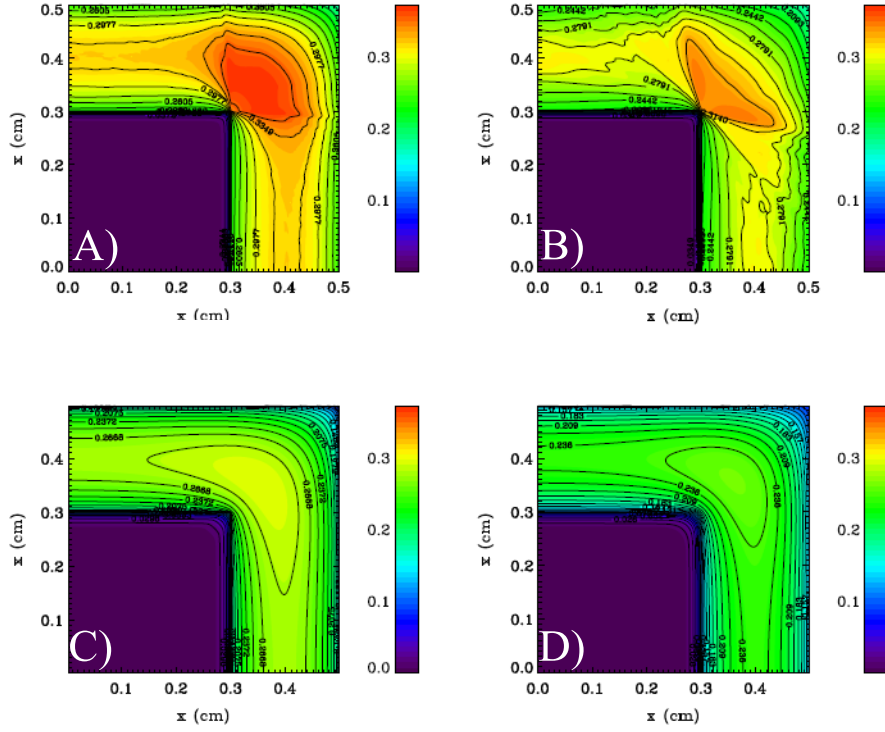


Figura 3.5: Mapas 2D de la energía radiativa en el test de Mordant. Figura obtenida de [32].

El método de resolución de estas ecuaciones en AMR y su acoplamiento con la materia, así como la problemática relacionada se describen extensamente en [64, 63] por lo que remitimos al lector interesado a la bibliografía.

3.6. El método AMR: *Adaptive Mesh Refinement*

En las secciones anteriores se han explicado los métodos numéricos usados para resolver cada una de las ecuaciones en derivadas parciales que modelan los fenómenos físicos a estudiar. Cada ecuación (o sistema de ecuaciones) necesita un método de resolución específico (los métodos aplicables a ecuaciones parabólicas, como la ecuación del calor, no son óptimos en ecuaciones hiperbólicas, como son las ecuaciones de Euler) y una discretización diferente en diferencias finitas. Estas diferencias en la discretización, el método de resolución y los fenómenos físicos representados, pueden dar lugar a resultados en los que el error numérico cambie fuertemente en distintas regiones

del sistema, debido a la aparición de zonas en las que sea necesario una mayor precisión para captar la estructura de la solución. Una solución podría consistir en refinar la malla de tal manera que, incluso en las zonas más complejas, se tenga suficiente resolución, a costa de aumentar considerablemente el tiempo de cálculo, lo cual, en el caso de la fluidodinámica de radiación, puede ser prohibitivo.

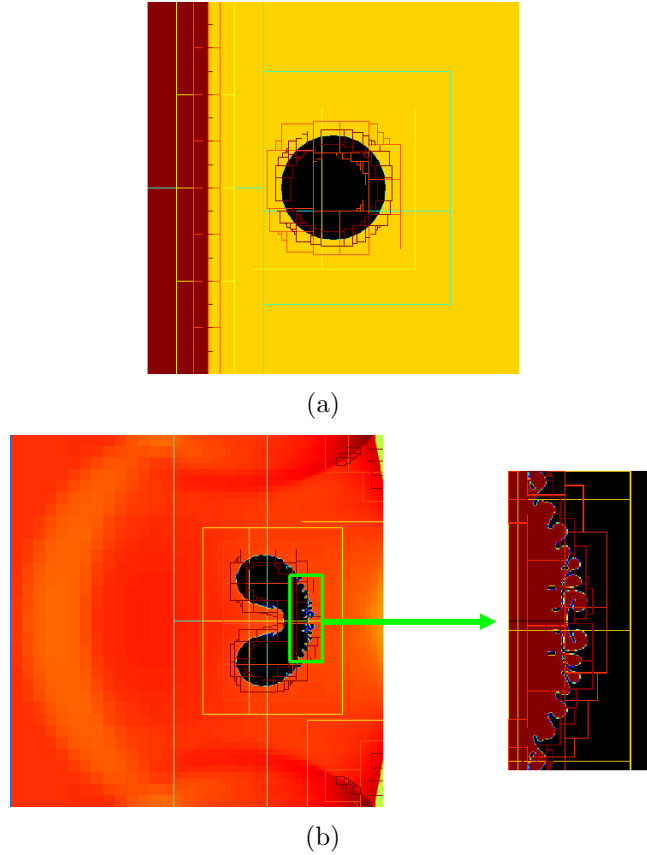


Figura 3.6: Simulación de una onda de choque incidiendo en una burbuja, en la que se han usado seis niveles de refinamiento. En a) se muestra el estado inicial del caso: una onda de choque (región izquierda) incidirá sobre una burbuja (en negro). Obsérvese la distribución de mallas en las zonas con gradientes de densidad. En b) tenemos la burbuja deformada al pasar la onda de choque. Las estructuras resultantes pueden observarse gracias al mallado refinado, mientras que, aguas arriba, la malla vuelve a ser gruesa.

El método AMR trata de concentrar el esfuerzo de cálculo en las zonas en las que se necesite mayor resolución, homogeneizando el error numérico en todo el dominio mientras se ahorra tiempo de computación al no usar

excesiva resolución en las zonas donde no es necesaria. En el caso del código ARWEN, donde se usan diferencias finitas para resolver los problemas, se obtiene mayor resolución refinando localmente la malla en las zonas donde se necesita, usando una malla gruesa en el resto del dominio.

La parte crucial del método AMR es la generación de la malla. Un refinamiento de la malla únicamente en ciertas partes del dominio de computación puede dar lugar a la pérdida de uniformidad, teniendo celdas más grandes que otras, lo cual evita que ciertos errores numéricos se compensen, emperorando el resultado. Otros mallados pueden romper la estructura de la malla, obteniendo celdas que no sean rectangulares y complicando sensiblemente el tratamiento numérico de las ecuaciones. En el código ARWEN se usa la variante de AMR conocida como *Block Structured Adaptive Mesh Refinement* [8, 81]. En este método se trabaja siempre con mallas estructuradas ortogonales clasificadas en *niveles*, de tal manera que cada nivel está compuesto por mallas con el mismo refinamiento. Así pues, el nivel inferior (nivel 0) ocupa todo el dominio y es el más grueso de toda la estructura. El nivel 1 consistirá en mallas de mayor refinamiento, superpuestas en zonas del nivel 0 donde se requiera mayor resolución. El nivel 2 serán mallas más finas todavía superpuestas en las zonas del nivel 1 que las necesiten; así hasta el número de niveles usado.

Las ecuaciones se resuelven en cada nivel, por lo que en ciertas zonas se realiza un trabajo redundante, pero esto se compensa sobradamente con el hecho de poder usar el mismo algoritmo para todas las mallas y la facilidad de extensión del método a computación en paralelo.

La situación de los parches en las diferentes partes del dominio y su superposición siguen ciertas normas:

- Todas las mallas dentro de un mismo nivel l tienen el mismo tamaño de celda. Dicho tamaño es un submúltiplo del nivel inferior $l-1$.
- El contorno de una malla del nivel l cae sobre el contorno de celdas del nivel $l-1$.
- Debe existir al menos una celda perteneciente a un nivel $l+1$ entre celdas de los niveles l y $l+2$.

Al aplicar el método de AMR a un sistema hiperbólico en general (como las ecuaciones de Euler), surge un nuevo problema: si se ha usado un método explícito (como el método de Godunov), el criterio de estabilidad depende del mallado, que es distinto en cada nivel. Así pues, el paso de tiempo ha de reducirse en los niveles de mallado más fino de tal manera que el número

CFL sea constante en todos los niveles, es decir:

$$\frac{\Delta t_0}{\Delta x_0} = \frac{\Delta t_1}{\Delta x_1} = \dots = \frac{\Delta t_L}{\Delta x_L} \quad (3.36)$$

Esto lleva a un esquema en el que, por cada paso temporal en el nivel más grueso, se realizan varios pasos temporales en los niveles más finos, dependiendo del nivel de refinamiento. Otra solución consiste en utilizar el paso de tiempo más pequeño (es decir, el del nivel más fino) y avanzar todos los niveles con dicho paso temporal. Esto facilita la lógica del programa pero aumenta los cálculos necesarios. Sin embargo, puede resultar necesario en casos en los que no haya una velocidad característica de propagación de señales.

El avance temporal en el método AMR para la resolución de ecuaciones hiperbólicas sigue el siguiente pseudocódigo:

```

For n=1,...,Nfinal
  Advance(0,t0n)
donde la subrutina Advance consiste en:
Advance(l,t)
  If(time to regrid)then
    Regrid(l)
  FillPatch(l,t)
  Integrate(l,t,Δtl)
  If(l < lfinest)then
    For i=1,...,rl
      Advance(l+1,t+(i-1)·Δtl+1)
      Average down(l,t+Δtl)
      Reflux(l,t+Δtl)
    End if

```

Cada una de estas subrutinas tiene una función específica:

- Regrid(l): genera un nuevo mallado en los niveles l+1 y superiores.
- FillPatch(l,t): rellena el nivel l con datos obtenidos del nivel inferior l-1 interpolando.
- Integrate(l,t,Δt): subrutina que resuelve el sistema de ecuaciones en la malla l.
- Average down(l,t): sustitución de los valores en el nivel l con una media de los valores calculados en el nivel l+1 (ya que estos son más precisos).
- Reflux(l,t): corrección de los flujos calculados al integrar el sistema de ecuaciones, para tener en cuenta las inconsistencias entre diferentes mallas.

Los tres módulos principales (hidrodinámica, conducción y radiación), están basados en el esquema anterior, para sacar el máximo partido al método de AMR.

3.7. Otros módulos

En la sección 3.2 se ha descrito la división en módulos del código ARWEN. Los tres módulos principales, que resuelven las ecuaciones de hidrodinámica de la radiación con conducción térmica se han descrito en los apartados anteriores. Sin embargo, el código ARWEN dispone de otros módulos que, si bien no son tan críticos para las simulaciones y la eficiencia del código, facilitan el uso y amplían el rango de aplicación de ARWEN. En esta sección se hablará del modelo de deposición de energía de un láser y de la salida de datos, ya que estos dos módulos han sido modificados en el marco de esta tesis, como se explicará en secciones posteriores.

3.7.1. Deposición de energía del láser

Los parámetros fundamentales de un haz láser son su energía, intensidad y la distribución espacial y temporal de ésta. Algunos de estos parámetros son bien conocidos en los experimentos y de fácil integración en el código (como son la energía total y la intensidad del láser), mientras que las distribuciones espacial y temporal pueden presentar perturbaciones más o menos marcadas dependientes del sistema. Por ello, ARWEN utiliza como entrada la energía por unidad de longitud (hay que recordar que, al ser un código 2D, se supone que el sistema es infinito en una dirección). Las distribuciones espacial y temporal se aproximan como funciones gaussianas de la forma $f(x) = \exp\left(\frac{x-\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right)^{2n}$, donde σ es la desviación típica, μ es un parámetro que indica la posición del máximo y n un número entero que varía la forma de la distribución. Como dato de entrada se da μ (sería el punto focal del láser en la distribución espacial y el tiempo de llegada del pico de radiación en la distribución temporal) y el *Full Width at Half Maximum* es decir, la anchura de la distribución cuando su valor es la mitad del máximo. Este valor está relacionado con la desviación típica: $FWHM = 2\sqrt{2\ln 2}\sigma$ y representa la anchura espacial del haz o bien la duración temporal de éste. También existe la posibilidad de dar la distribución temporal punto a punto, pudiendo introducir cualquier forma temporal del pulso láser.

La deposición de energía sigue un modelo simple: para cada paso de tiempo, se calcula la fracción de energía que alcanza al blanco en dicho intervalo temporal. Esta fracción se reparte en cada columna de celdas, dependiendo

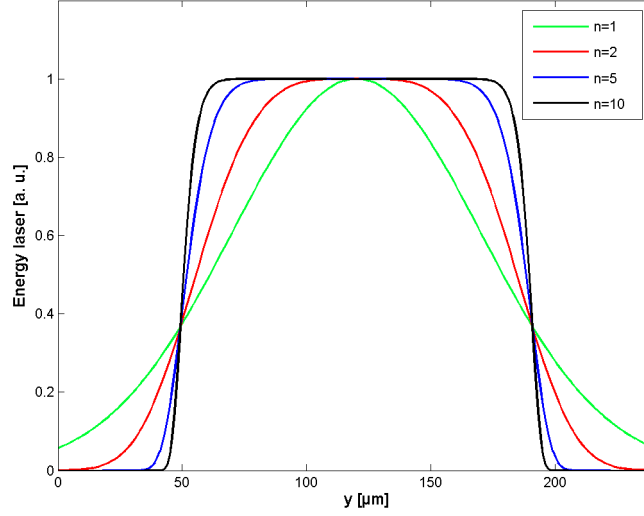


Figura 3.7: Perfil espacial transversal de la línea focal del láser en el plano definido por la superficie del blanco. Para $n =$ se tiene un perfil gaussiano y para $n = 10$ uno super-gaussiano. Figura obtenida de [12].

de la distribución espacial elegida variando n . En cada columna de celdas se calcula la energía absorbida en cada celda teniendo en cuenta el mecanismo de Bremsstrahlung Inverso 2.2.

Este mecanismo pierde importancia en la región de densidad crítica. En esta región, el mecanismo de absorción predominante es la absorción resonante. Computacionalmente, cuando se detecta que $1 - n_e/n_c < \epsilon$ siendo ϵ cierta tolerancia, se considera que se ha llegado a la zona de densidad crítica y la energía del láser restante se reparte entre las tres celdas más cercanas (para evitar inestabilidades).

3.7.2. Salida en formato RWM

La lectura (tablas de ecuaciones de estado y opacidades) y escritura (salida del código ARWEN) de datos se realizan con el sistema RWM, desarrollado junto con el código ARWEN. Este sistema se encarga del volcado de resultados a disco y como interfaz para el postproceso gráfico. Presenta grandes ventajas en cuanto a velocidad de lectura-escritura y accesibilidad de datos. Este sistema de almacenamiento de datos fue desarrollado por los profesores P. Velarde y F. Ogando para facilitar el uso de grandes cantidades de datos de una manera eficiente en códigos hidrodinámicos.

La librería RWM se compone de diversas subrutinas, divididas en tres niveles según su complejidad. En [62] se describen con detalle las subrutinas que componen cada uno de estos niveles, mientras que en esta tesis nos centraremos únicamente en describir brevemente el nivel de usuario o tercer nivel. Estas funciones se usan directamente por el usuario para leer y escribir ficheros así como recibir la información necesaria para dichas tareas. Estas funciones, declaradas en el fichero `rwm_3.h`, se pueden diferenciar en utilidades de uso general, de lectura de ficheros y de escritura de ficheros.

Las subrutinas de uso general del tercer nivel de RWM son:

- `rwm3OpenFile` Selecciona un fichero como el activo.
- `rwm3CloseFile` Cierra un fichero.
- `rwm3Tell` Devuelve la posición absoluta en el fichero actual.
- `rwm3Size` Devuelve el tamaño (en bytes) del fichero activo.
- `rwm3Update` Actualiza de las listas de posiciones de los inicios de ciclo.
- `rwm3Time` Devuelve el valor de la variable temporal del ciclo actual.
- `rwm3Mark` Realiza una marca en la posición dada del fichero activo.
- `rwm3GoMark` Posiciona el fichero activo en la última marca realizada.

Así mismo, las subrutinas de lectura correspondientes son:

- `rwm3GetVars` Busca y procesa las definiciones de variables.
- `rwm3Free` Libera la estructura de nombres de variables.
- `rwm3NumData` Devuelve la dimensión del array de datos.
- `rwm3Lectura` Lee el contenido del registro.
- `rwm3Av1` Avanza hasta el comienzo del siguiente ciclo.
- `rwm3Re1` Retrocede hasta el comienzo del ciclo anterior.
- `rwm3Av2` Avanza dentro de un ciclo hasta la aparición siguiente de una variable dada.
- `rwm3AvNoJump` Avanza dentro de un ciclo hasta la aparición de una variable dada.
- `rwm3Re2` Retrocede hasta el inicio del ciclo actual.

- `rwm3Av3` Se sitúa en la n-ésima aparición de una variable.
- `rwm3Begin` Sitúa el puntero en el inicio del primer ciclo.
- `rwm3End` Sitúa el puntero en el inicio del último ciclo.
- `rwm3Busc` Busca una variable para un valor temporal.
- `rwm3SetTimeID` Define la variable temporal.
- `rwm3VarID` Devuelve el código de la variable.

Finalmente, las subrutinas de escritura son:

- `rwm3WriteName` Escribe la definición de una nueva variable.
- `rwm3WriteTimeName` Escribe la definición de la variable temporal.
- `rwm3WriteTime` Escribe el inicio de un nuevo ciclo.
- `rwm3WriteVar` Escribe en disco un registro de datos de una variable.

Ya que el fin de éste capítulo es describir el código ARWEN y el conocimiento exhaustivo de estas subrutinas no es necesario para su uso y desarrollo, no se ha creído necesario describir con mayor profundidad el formato `rwm`. En caso de estar interesado, se puede consultar [62] donde se encuentra una descripción mucho más detallada junto con ejemplos de uso de esta librería.

3.8. Mejoras introducidas en ARWEN en el marco de la tesis

En las secciones anteriores se han descrito las bases del código ARWEN. Sin embargo, para adecuarlo a la simulación de plasmas amplificadores de radiación X, se han desarrollado diferentes mejoras a lo largo de esta tesis, siendo las más importantes la introducción de un modelo de dos temperaturas en la hidrodinámica, subrutinas de *ray-tracing* en la deposición del láser para tener en cuenta la refracción del haz en el plasma y salida en formato HDF, formato de datos estándar que ha facilitado el postproceso de los datos obtenidos con ARWEN.

3.8.1. Modelo de dos temperaturas

En ciertas condiciones, un plasma se puede considerar como un fluido formado por iones y electrones. Estos dos componentes tienen diferentes propiedades físicas y distinto comportamiento. Por ejemplo, la energía del láser es absorbida principalmente por los electrones, mediante el mecanismo de *Bremstrahlung* inverso, cediendo parte de esta energía a los iones mediante colisiones. El tiempo medio necesario para realizar esta transferencia de energía es (ver referencia [111])

$$\tau_{ei} = \frac{3,5 \cdot 10^8 A (kT_e)^{3/2}}{N Z^2 \ln \Lambda} \quad (3.37)$$

donde A es la masa atómica, N es la densidad de iones, T_e la temperatura de los electrones y $\ln \Lambda$ es el logaritmo Coulombiano. Para tener una idea del orden de magnitud, para los valores $N = 10^{20} \text{cm}^{-3}$, $kT_e = 1000 \text{eV}$, $Z = 10$ y $A = 56$, el tiempo de relajación es del orden de un nanosegundo $\tau_{ei} \approx 10^{-9} \text{s}$; es decir, electrones e iones alcanzarán el equilibrio termodinámico en aproximadamente un nanosegundo y podrán considerarse el mismo fluido a efectos prácticos. Así pues, al modelar sistemas con tiempos característicos mayores que el tiempo de relajación, se podrá considerar que electrones e iones están en equilibrio termodinámico y que siguen las ecuaciones de un fluido.

Este requisito, por ejemplo, se cumple en los láser de rayos X que usan el esquema QSS (Quasy Steady State), explicado anteriormente. Sin embargo, el esquema que se estudiará en esta tesis es el conocido como TCE (Transient Collisional Excitation). En este esquema, un láser crea y calienta el plasma hasta obtener iones neonoides o niqueloides. Hasta este momento, la aproximación de un fluido sigue siendo válida. La inversión de población se produce calentando los electrones que, por colisiones con los iones, los llevarán a estados excitados. El calentamiento de los electrones ha de ser prácticamente instantáneo, por lo que se usan láseres de picosegundos. Este tiempo es mucho menor que el tiempo de relajación ya que lo que interesa es tener un fluido de electrones muy caliente que excite a los iones, por lo que la aproximación anterior pierde su validez: los electrones tendrán temperaturas muy distintas que los iones, no estarán en equilibrio. Por supuesto, se pueden realizar otras aproximaciones para estudiar este esquema usando un código de una temperatura, como en [14, 68], pero es conveniente disponer de un esquema de dos temperaturas. El esquema introducido fue desarrollado por P. Velarde programado por M. González [101] e introducido en ARWEN por M. González y E. Oliva. Los detalles del esquema están pendientes de publicación.

Una vez realizadas las correcciones en la fluidodinámica, es necesario tener en cuenta las dos temperaturas de los fluidos electrónico e iónico en las subrutinas de conducción (de cara al transporte de radiación bastará con utilizar como temperatura de la materia la del fluido electrónico ya que la radiación interacciona preferentemente con los electrones).

La conducción térmica tiene lugar mayoritariamente en el fluido electrónico debido a la mayor movilidad de los electrones. A través de colisiones, el fluido electrónico cede parte de su energía al iónico, hasta llegar al equilibrio térmico en tiempos superiores al tiempo de relajación 3.37.

Las ecuaciones a resolver son entonces:

$$\rho c_{ve} \frac{\partial T_e}{\partial t} = \nabla (\kappa_e \nabla T_e) - \frac{\rho c_{ve}}{\tau} (T_e - T_i) + S_e \quad (3.38)$$

$$\rho c_{vi} \frac{\partial T_i}{\partial t} = \frac{\rho c_{ve}}{\tau_{ei}} (T_e - T_i) \quad (3.39)$$

donde los subíndices indican fluido electrónico o iónico. Discretizando implícitamente la ecuación 3.39 se puede simplificar la resolución del sistema. Llamando $\omega_{ei} = \rho \frac{c_{ve}}{\tau_{ei}}$ se obtiene:

$$\rho c_{vi} \frac{T_i - T_i^0}{\Delta t} = \omega_{ei} (T_e - T_i) \quad (3.40)$$

Despejando la temperatura iónica avanzada en el tiempo en función de la temperatura electrónica se obtiene

$$T_i = \frac{\omega_{ei}}{\rho \frac{c_{vi}}{\Delta t} + \omega_{ei}} T_e + \frac{c_{vi}}{c_{vi} + \frac{\Delta t \omega_{ei}}{\rho}} T_i^0 = \frac{\omega_{ei}}{\rho \frac{c_{vi}}{\Delta t} + \omega_{ei}} T_e + \omega_{mod} T_i^0 \quad (3.41)$$

Este valor aproximado para la temperatura iónica avanzada se puede introducir en la ecuación 3.38, obteniendo una única ecuación para T_e :

$$\left(\rho c_{ve} + \omega_{ei} \Delta t \frac{c_{vi}}{c_{vi} + \frac{\omega_{ei} \Delta t}{\rho}} - \Delta t \nabla \cdot \kappa \nabla \right) T_e = \omega_{ei} \tau_{ei} T_e^0 + \omega_{ei} \omega_{mod} \Delta t T_i^0 \quad (3.42)$$

donde el término $\nabla(\kappa \nabla T_e)$ se discretiza como en el caso de una temperatura.

Una vez resuelta la ecuación de conducción en el fluido electrónico y obtenido una temperatura T_e avanzada, es necesario calcular la nueva energía interna del fluido electrónico y del total (o lo que es lo mismo, la nueva energía interna del fluido iónico para luego sumársela a la del electrónico). Estas se obtienen de la ecuación de estado (por ejemplo $e_e \equiv e_e(T_e, \rho)$).

3.8.2. Deposición láser y trazado de rayos

El código ARWEN se ha usado para simular plasmas creados mediante láseres. Así pues, la interacción láser-plasma juega un papel fundamental dentro del código. Si deseamos estudiar la evolución de un plasma durante tiempos mayores que la duración del láser, será suficiente con el uso de una subrutina simple que calcule la deposición de energía dependiendo de la densidad y temperatura del plasma únicamente, ya que el láser estará interaccionando con un plasma en sus etapas iniciales donde los efectos de refracción serán despreciables.

Sin embargo, cuando un láser interacciona con un plasma completamente desarrollado, en el que haya fuertes gradientes de densidad que varíen el índice de refracción de una región a otra, los efectos de refracción pueden ser importantes. Por ejemplo, en los láseres de rayos X que usan el esquema GRIP, se aprovecha el efecto de la refracción del haz láser en el plasma para maximizar la deposición de energía en la zona adecuada. Por ello es conveniente disponer de subrutinas de trazado de rayos (*ray-tracing*) que permitan tener en cuenta la refracción y la deposición de energía del haz láser en el plasma.

Para ello se ha programado un módulo para el código ARWEN en el que se pueden definir las características del haz láser, como energía, duración temporal, forma espacial, posición del foco, etc ... A partir de estos datos, el módulo se encarga de calcular la energía depositada en el plasma siguiendo tres pasos:

- Dividir el haz láser en *rayos* de igual energía.
- Calcular la trayectoria de cada rayo.
- Calcular la energía depositada en cada celda y la consiguiente atenuación del rayo.

Datos de entrada

Al calcular los efectos de la refracción del haz láser en los gradientes de densidad electrónica formados en el plasma en expansión, es necesario tener en cuenta, al menos de forma aproximada, la manera de focalizar el haz láser. Para ello se ha de definir una recta sobre la que se distribuye la energía del láser, equivalente a la lente que focaliza el haz, el eje de la lente y el punto focal de dicha lente.

El origen de coordenadas es la esquina inferior izquierda de la ventana de computación. Así mismo se ha de programar la función de distribución de

la energía en la lente (una distribución de gauss o una super-gaussiana por ejemplo). No es necesario que esta función de distribución este normalizada ni a la unidad ni a la energía del láser, ya que solo se utilizará para dividir el haz en rayos. Los restantes datos de entrada (distribución temporal, energía, duración) se siguen introduciendo en el fichero laser.dat.

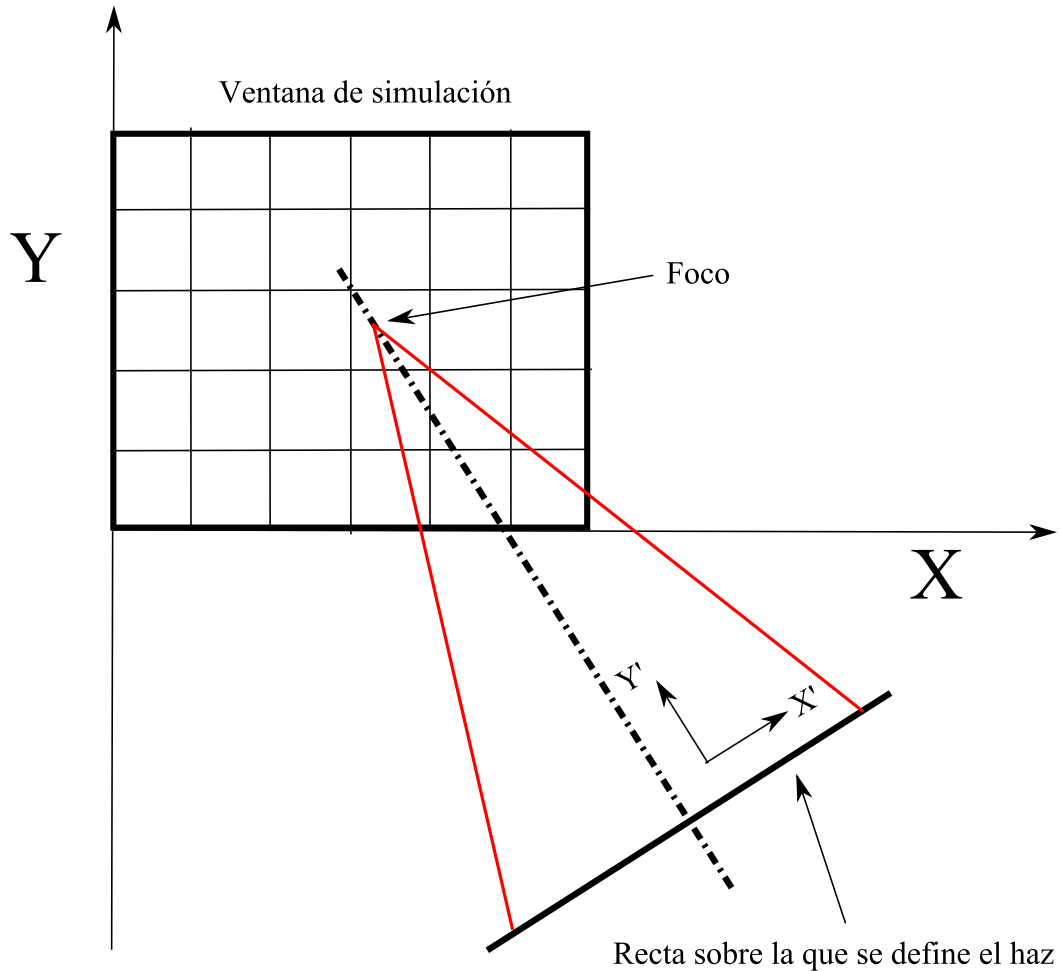


Figura 3.8: Esquema básico del modelo 2D de trazado de rayos implementado en ARWEN. La lente se representa por una recta sobre la que se define la distribución espacial y un punto focal.

Integración de funciones

Dentro de la subrutina de trazado de rayos, una parte importante del tiempo de computación se gasta en realizar integraciones de los perfiles espaciales y temporales del láser. Inicialmente, es necesario integrar el perfil

espacial del láser (ya que éste es arbitrario y no tiene por qué estar normalizado a la unidad) para posteriormente dividirlo en rayos de igual energía. En esta división es necesario realizar un gran número de integraciones de pequeñas partes del perfil.

De manera común con la subrutina original de deposición de energía, es necesario integrar el perfil temporal del haz si se desea conocer su duración y su intensidad y, en cada paso de tiempo, hay que calcular el área del perfil entre las abscisas t y $t + \Delta t$ para saber la energía disponible en dicho paso de tiempo.

Así pues, debido al elevado número de integraciones a realizar, es necesaria una subrutina que pueda integrar perfiles arbitrarios y de manera rápida. Por ello se ha usado una regla de Simpson. Una descripción del algoritmo (y posibles extensiones) se puede encontrar en cualquier libro de análisis numérico, como puede ser [29].

Los métodos de Simpson se basan en aproximar la integral de una función por la integral de un polinomio de orden n que interpola a dicha función:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x_s) \quad (3.43)$$

Para $n = 2$ se obtiene la regla $\frac{1}{3}$ de Simpson:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi) \quad (3.44)$$

donde $f_i \equiv f(x_i)$, x_1 es el punto medio del intervalo $[x_0, x_2]$ y $h = \frac{x_1 - x_0}{2}$.

Usando repetidas veces esta fórmula, en la que solo entran en juego sumas y multiplicaciones sencillas y una división, se puede calcular con la exactitud necesaria (es de quinto orden) la integral del perfil dado.

Cálculo de la trayectoria de los rayos

El cálculo de la trayectoria de los rayos es la parte más compleja y de mayor costo computacional de este paquete. Para cada rayo se calcula la trayectoria que sigue en la ventana de simulación hasta que escapa de ésta o es absorbido completamente. En este cálculo se realiza la simplificación de que la densidad electrónica es constante en cada celda y los rayos en el interior de las celdas son líneas rectas.

El algoritmo de cálculo de trayectorias es como sigue:

1. Se parte de la recta que define el rayo y de un punto inicial en un borde de celda. La siguiente celda en la que puede penetrar el rayo será adyacente a dicho borde. El algoritmo que calcula el punto de

corte (que se explicará posteriormente) también indica el borde donde se encuentra dicho punto y, por tanto, la nueva celda.

2. Se calcula el índice de refracción en el interior de dicha celda, que viene dado por: $n = \sqrt{1 - \frac{n_e}{n_c}}$.
3. Se comprueba si el rayo penetra en dicha celda (es decir, se refracta) o se refleja. La condición para reflexión total interna es $\frac{n_i}{n_r} \sin \theta_i > 1$. Si se da esta condición el rayo se refleja.
4. Se calcula la nueva recta usando la ley de Snell $n_i \sin \theta_i = n_r \sin \theta_r$ si el rayo se refracta o bien la ley de reflexión $\theta_i = \theta_r$ si se refleja.
5. Se calcula el punto de corte de la nueva recta con la celda y se vuelve al punto 1. El cálculo del punto de corte es la parte más compleja de este algoritmo (aunque pueda parecer trivial a simple vista). De hecho, debido al coste computacional de realizar esta operación múltiples veces se han desarrollado diversos algoritmos en el campo de los gráficos creados mediante computadores para optimizar el proyecto. El algoritmo que se ha usado aquí es el de *Cohen-Sutherland*.

El algoritmo de Cohen-Sutherland es un algoritmo de *line clipping*, usado para calcular rápidamente que partes de una línea serían visibles dentro de una ventana de visualización, devolviendo los dos puntos que delimitan el segmento visible. Con esos dos puntos, se puede calcular la longitud del segmento (y la deposición de energía en la celda) y el ángulo del rayo (para calcular su reflexión o refracción).

Partiendo de dos puntos de la línea, se determinan si están dentro o fuera de la ventana de visualización definiendo un código para cada punto. En concreto, cada borde de la ventana divide el espacio en dos regiones: interior y exterior. Cuando la región es interior respecto a un borde, se le asigna el bit 0, mientras que cuando es exterior respecto a dicho borde, se le asigna el bit 1. Así pues, contando la ventana de visualización, aparecen nueve regiones distintas, a las que se les ha asignado un código binario de cuatro dígitos.

Según la convención seguida en la figura 3.9, las regiones exteriores respecto al borde izquierdo tienen un 1 en el primer bit, respecto al derecho en el segundo, respecto al inferior en el tercero y respecto al superior en el cuarto. La ventana central, que es la de visualización, es interior respecto a todos los bordes y por tanto recibe el código binario 0000. Conociendo las coordenadas de la ventana de visualización (x_{min}, y_{min}) y (x_{max}, y_{max}) , es sencillo asignar un código binario a un punto cualquiera (x, y) :

- Si $x < x_{min}$ entonces el primer bit es 1

1001	0001	0101
1000	0000	0100
1010	0001	0110

Figura 3.9: Códigos binarios atribuidos a cada región en el algoritmo de Cohen-Sutherland . La ventana de visualización se ha marcado en rojo y se le asigna el código 0000.

- Si $x > x_{max}$ entonces el segundo bit es 1
- Si $y < y_{min}$ entonces el tercer bit es 1
- Si $y > y_{max}$ entonces el cuarto bit es 1

Una vez que se dispone de los códigos de los puntos que delimitan el segmento, se realizan una serie de operaciones lógicas iterativamente hasta encontrar los dos puntos de corte del segmento con la ventana:

1. OR bit a bit. Si el resultado es 0000, los dos puntos están dentro de la ventana, por lo que tenemos el segmento y se acaba el algoritmo.
2. AND bit a bit. Si el resultado no es 0000, el segmento no corta a la ventana. En nuestro caso esto no puede ocurrir, ya que siempre se elige la ventana de tal manera que la línea la corta.
3. Si se han pasado los dos tests anteriores, se sabe que la línea corta a la ventana y que al menos un punto está fuera de ella (en nuestro caso se puede asegurar que es sólo un punto ya que el segundo se ha calculado previamente en el borde de la ventana). Así pues, se elige el punto exterior y se lee su código binario en orden. Si se encuentra un 1, se calcula la intersección de la recta con el borde correspondiente a la posición del bit 1 y se repite el algoritmo con este nuevo punto (que tendrá un bit 0 en la posición donde antes tenía el 1).

El resultado final son los dos puntos de corte del segmento con los bordes de celda. Haciendo esto en todas las celdas que atraviesa el rayo, se obtiene la trayectoria de éste (por si se quiere para postprocesarla) y se calcula la energía depositada en cada celda en la parte final del algoritmo.

Cálculo de la energía depositada

La atenuación de la radiación en la materia se puede modelar según una ley exponencial, en la que la energía de la radiación va decreciendo según recorre el medio, al depositarse la energía en éste por diferentes mecanismos:

$$E = E_0 e^{-\kappa \cdot l} \quad (3.45)$$

donde E_0 es la energía inicial, l la longitud recorrida en el medio y κ el coeficiente de extinción. Obviamente, esta sencilla fórmula no es válida para el recorrido de un rayo en el interior de un plasma inhomogéneo (recordemos que el rayo atraviesa zonas de muy baja densidad hasta acercarse a la densidad crítica). Sin embargo, es bastante exacta si, al igual que se ha hecho antes al aproximar las trayectorias de los rayos por una sucesión de rectas, se aplica por separado a cada celda de la malla, donde como es habitual se supone que la densidad electrónica y temperatura son constantes.

El siguiente paso consiste en calcular el valor de κ . El mecanismo de absorción de energía predominante en la interacción láser-plasma es el *Bremhsstrahlung Inverso* (ver sección 2.2.3). La longitud l recorrida se calcula a partir de los dos puntos que nos ha devuelto el algoritmo de Cohen-Sutherland y finalmente, la energía depositada será $E_0 - E = E_0(1 - e^{-\kappa \cdot l})$, donde ahora E_0 será la energía del rayo al entrar en la celda.

El mecanismo de *Bremhsstrahlung Inverso* deja de ser el principal cerca de la zona de densidad crítica, donde la *Absorción Resonante* predomina. En esta zona, con densidad electrónica $n_e = n_c \cos^2 \theta$, el haz se refleja y deposita gran parte de su energía. El modelado de este mecanismo es bastante más complejo ya que depende del ángulo de incidencia y de la polarización del haz, por lo que es una práctica común en códigos de modelar este mecanismo depositando en la zona un porcentaje de la energía que llega.

3.8.3. Paralelización de la conducción térmica

El aumento de las capacidades de computación de un código, así como la necesidad de simulaciones con gran resolución aumentan considerablemente el tiempo de cálculo. El método de AMR permite obtener muy buena resolución espacial sin incrementar demasiado el tiempo de computación. Sin

embargo, otras variables como la resolución angular y en energía del transporte de radiación o la inversión de la matriz resultante del esquema implícito que trata la conducción electrónica siguen consumiendo la mayoría del tiempo de cálculo. Así mismo, la simulación de plasmas creados con pulsos láser ultracortos (centenas de femtosegundos) imponen pasos temporales muy pequeños, por lo que es necesario realizar un gran número de pasos temporales para estudiar la evolución del plasma y optimizar el tiempo de cálculo necesario para realizar un paso temporal se convierte en una tarea crucial.

El paquete fluidodinámico y de AMR, Boxlib [26] ya se encuentra paralelizado, pudiendo elegir al compliarlo si se desea un ejecutable en serie o en paralelo y la mejora y paralelización del transporte de radiación es el sujeto de la tesis de C. García y será descrito en ella [28]. Así, en esta tesis se ha realizado la paralelización del paquete de conducción térmica, usando la librería de inversión de matrices HIPS [27].

HIPS es una librería orientada a la resolución de sistemas lineales con matrices dispersas (sean simétricas o no, reales o complejas). La librería tiene así mismo una interfaz para llamarla desde otros programas (como es el caso de ARWEN) escritos en C, C++ o FORTRAN. Esta librería necesita para su uso un particionador externo que divida la matriz en subdominios que se repartirán entre los diferentes procesadores. En esta tesis se ha usado la librería recomendada por los autores de HIPS, SCOTCH [74], aunque la librería MeTiS [2] también está disponible.

Los pasos necesarios en ARWEN consisten únicamente en crear una matriz en formato *Compress Sparse Row* CSR (es decir, un vector con los valores distintos de cero de la matriz, otro vector con los índices en el anterior del primer elemento de cada fila y por último, otro vector indicando la columna de cada elemento del primer vector) resultante de la discretización usada (ver sección 3.4) y un vector correspondiente al lado derecho de la ecuación a resolver. Una vez hecho esto, la librería HIPS se encarga internamente de distribuir el trabajo entre procesadores y resolver el sistema, devolviendo el vector solución.

Para obtener los coeficientes en primer lugar se proyectan todos los datos en las diferentes mallas en una sola malla fina que cubre todo el dominio de computación. Es a ésta malla a la que se aplica la discretización dada en 3.4. La matriz resultante puede contener facilmente decenas de miles de elementos (por ejemplo, una simulación con dos niveles de refinamiento y 100×100 celdas en el nivel daría lugar a una malla fina que cubriera todo el dominio de 400×400 celdas y la matriz resultante a invertir sería de 160000×160000 elementos. Al ser una matriz pentadiagonal, la mayoría de estos elementos serán nulos pero aún así, su coste de inversión en cada paso temporal sería prohibitivo si no se paralelizara su inversión.

Una vez obtenidos los coeficientes se procede a inicializar los cálculos de inversión, indicando si la matriz es simétrica o no (para acelerar el cálculo), el número de iteraciones máximo, la tolerancia en las iteraciones y otros parámetros más técnicos. El primer paso consiste en inicializar el problema (ya que pueden existir diferentes a la vez) mediante la subrutina

```
INTS HIPS_Initialize(INTS idnbr)
```

Esta subrutina se encarga de crear los contenedores de datos internos necesarios para la resolución de un sistema lineal.

El siguiente paso es la creación del grafo de adyacencia de la matriz en formato CSR, que se realiza mediante la subrutina

```
INTS HIPS_GraphGlobalCSR(INTS id, INTS n, INTL *rowptr,  
                          INTS *cols, INTS root)
```

donde `id` identifica el problema a resolver (en nuestro caso sólo hay uno), `n` es el número de columnas de la matriz, `rowptr`, `cols` son los vectores con los índices de columnas y los punteros mencionados anteriormente y `root` es indicador del proceso principal que introduce los datos globales. La subrutina devuelve `HIPS_SUCCESS` o bien `HIPS_ERR_xx` en caso de que haya existido algún error.

Una vez construido el grafo, se introduce la matriz y el vector lado derecho mediante las subrutinas

```
INTS HIPS_MatrixGlobalCSR(INTS id, INTS n, INTL *rowptr,  
                          INTS *cols, COEF *values,  
                          INTS root, INTS op, INTS sym)
```

```
INTS HIPS_SetGlobalRHS(INTS id, COEF *b, INTS root,  
                      INTS op)
```

donde `values` es el vector con los valores de la matriz, `op` indica la operación a realizar con la matriz (añadir los valores a la matriz previamente existente o bien reescribirla) y `sym` indica si sólo se han dado los coeficientes correspondientes a la parte triangular inferior (caso que la matriz sea simétrica) o no. Así mismo, `b` es el vector lado derecho del sistema de ecuaciones.

La solución completa se obtiene en el proceso raíz mediante la subrutina

```
INTS HIPS_GetGlobalSolution(INTS id, COEF *x, INTS root)
```

Obviamente, `x` es el vector solución. Una vez obtenida ésta, es puede finalizar el uso de la librería mediante las subrutinas

```
INTS HIPS_Clean(INTS id)
```

```
INTS HIPS_Finalize()
```

Esta descripción deja patente la gran ventaja que representa usar la librería HIPS, ya que el usuario solo debe conocer las subrutinas de la interfaz e internamente se realizan las operaciones más complejas de creación de grafos, reparto de carga, etc... Por supuesto, en caso de que se desee un mayor control, se dispone de acceso a estos parámetros. Así mismo, la interfaz está disponible tanto en lenguaje C como en FORTRAN.

En resumen, se ha introducido dentro de ARWEN la posibilidad de calcular la conducción térmica en paralelo mediante el uso de la librería HIPS. El código resultante es fácilmente modificable (los coeficientes se calculan de manera independiente) y es un paso más hacia la completa paralelización de ARWEN.

3.8.4. Salida en formato HDF

El postproceso de los datos obtenidos en códigos fluidodinámicos es de capital importancia para aprovechar al máximo las capacidades de los códigos. En nuestro caso y, como se explicará más detalladamente, los datos hidrodinámicos proporcionados por ARWEN se usan para calcular parámetros atómicos como la ganancia y la fluencia de saturación y, posteriormente, la amplificación de un haz inyectado. Para ello es necesario utilizar diferentes códigos cuyas entradas y salidas suelen ser completamente distintas. Por ello es conveniente estandarizar estas entradas y salidas para facilitar el uso combinado de los códigos y reducir el tiempo y trabajo necesario al realizar las simulaciones.

En nuestro caso, el problema consistía en utilizar la salida de ARWEN (en formato propio rwm) como entrada de una subrutina de cálculo de la ganancia (con entradas y salidas en formato ASCII) y usar las salidas de ARWEN y de la subrutina de ganancia como entradas del código SHADOX (que pide ficheros en formato HDF). El paso de formato rwm a ASCII y su posterior postproceso era una tarea tediosa y que podía dar lugar a errores del usuario. Así mismo, no se disponía de subrutinas para generar la entrada en HDF de SHADOX. Se decidió pues unificar el formato de los ficheros, para automatizar al máximo el postproceso. Se eligió para ello el formato HDF [4] ya que es un formato estándar (a diferencia del rwm, que ha sido desarrollado en el Instituto de Fusión Nuclear). El formato ASCII fue descartado desde el principio debido a su lentitud de lectura-escritura así como su enorme costo en memoria.

En cada fichero HDF se guardan los datos de densidad, temperatura, velocidad, etc... para los diferentes pasos de tiempo. Cada conjunto de datos para un tiempo dado es guardado como un *DataSet*. Así mismo, cada *DataSet* tiene unos *Atributos* como pueden ser el tiempo, número de celdas, ancho de malla, etc ... Teniendo esto claro, los procesos de lectura y escritura usando las subrutinas estándar que HDF provee son sencillos.

La interfaz de HDF tiene subrutinas de C y FORTRAN, por lo que su uso en uno de estos dos lenguajes es directo. Sin embargo, el uso de arrays multidimensionales presenta cierto problema al usar C y FORTRAN de manera combinada, debido a la diferente manera de almacenar en memoria los valores: FORTRAN almacena las matrices de manera que los datos de las filas son consecutivos (es decir, al variar en una unidad el índice i de la matriz $A(i, j)$ nos desplazamos a una posición consecutiva en la memoria), mientras que C almacena las matrices de manera que los datos de las columnas son consecutivos (ahora nos movemos a posiciones consecutivas al variar el índice j en $A[i][j]$). Es necesario tener en mente esto al leer y escribir ficheros que vayan a leerse o escribirse en otro lenguaje.

Como ejemplo, se describirá detalladamente la lectura de datos en la subrutina de cálculo de la ganancia. Esta subrutina abre ficheros HDF creados con ARWEN que contienen los datos hidrodinámicos, calcula diversos parámetros atómicos como la ganancia y la fluencia de saturación y los escribe en formato HDF. Al ser un ejemplo simple, solo se usarán funciones básicas. Un listado completo de todas las funciones y su uso se puede encontrar en la bibliografía [4, 3].

Lectura

En primer lugar se ha de abrir el fichero a leer con la orden

`int32 SDstart(char *filename, int32 access_mode)` donde se debe dar una cadena de caracteres con el nombre del fichero y el modo de acceso (lectura, escritura o creación; `DFACC_READ`, `DFACC_WRITE`, `DFACC_CREATE` respectivamente). La función devuelve un identificador del fichero o bien FALLO (-1).

Una vez abierto el fichero, se elige que *DataSet* leer. En el caso de la subrutina de cálculo de ganancia, el tiempo en el que se calcula ésta es un valor dado por el usuario, por lo que hay que buscar que *DataSet* tiene en el *atributo* "tiempo" guardado un valor inmediatamente superior al dado y abrir dicho *DataSet*. Para ello se utilizan las siguientes funciones:

1. `int32 SDselect(int32 sd_id, int32 sds_index)` Esta función nos devuelve un identificador al *DataSet* indicado en `sds_index` (el primero, segundo, etc... del fichero correspondiente al identificador `sd_id`).

2. `int32 SFindattr(int32 obj_id, char *attr_name)` Esta función nos devuelve un identificador al atributo con nombre `attr_name` (por ejemplo "Time") contenido en el *DataSet* `obj_id`.
3. `intn SDreadattr(int32 obj_id, int32 attr_index, VOIDP attr_buf)` Esta función almacena en `attr_buf` el valor del atributo `attr_index` del *DataSet* `obj_id`. Devuelve SUCCEED (0) o FAIL (-1).
4. `intn SDreaddata(int32 sds_id, int32 start[], int32 stride[], int32 edge[], VOIDP buffer)` Esta función almacena en `buffer` los datos leídos del *DataSet* `sds_id`. En `start` y `stride` se especifican donde comenzar a leer y el intervalo entre datos leídos en cada una de las dimensiones del *DataSet*. En `edge` se especifica el número de valores a leer en cada dimensión. Esta función devuelve SUCCEED o FAIL.

Una vez obtenidos los datos, se cierra el acceso al *DataSet* con la función
`intn SDendaccess(int32 sds_id)`
y se cierra el fichero con
`intn SDend(int32 sd_id)`

3.9. Conclusiones

En este capítulo se ha descrito el código ARWEN. Éste es un código hidrodinámico bidimensional, con transporte de radiación que usa la técnica de Malla Adaptativa Refinada (AMR). Por razones de espacio, se ha tratado de explicar brevemente las bases de los distintos paquetes que forman el código, de manera que el usuario final conozca los puntos fuertes y las limitaciones que puedan tener los métodos utilizados. Así pues, se remite al lector interesado en profundizar en partes específicas del código a la bibliografía dada.

Éste código, desarrollado inicialmente para aplicaciones en Fusión por Confinamiento Inercial, ha sido adaptado en el marco de esta tesis al estudio de láseres de rayos X basados en plasmas. Para ello se han introducido mejoras en el código (trazado de rayos, salida estandarizada en formato HDF, paralelización de la conducción electrónica, modelo de dos temperaturas...) de tal manera que se ha podido usar de manera satisfactoria en la modelización de éstos plasmas, como se expondrá en capítulos posteriores. Estas mejoras se han descrito en la parte final de este capítulo, con lo que se tiene una descripción completa de los métodos y las capacidades de este código.

Capítulo 4

Postproceso de datos

4.1. Introducción

El código ARWEN nos permite calcular diversos parámetros hidrodinámicos de los plasmas amplificadores, como pueden ser la densidad electrónica, temperaturas electrónica e iónica, ionización media, velocidades de expansión, etc... Estos parámetros son de vital importancia en el momento de caracterizar experimentos, ya que permiten por un lado comparar resultados experimentales y comprobarlos, y por otro, conocer los valores de ciertos parámetros de muy difícil medida en un laboratorio.

Sin embargo, en esta tesis no estamos interesados únicamente en la diagnosis de plasmas amplificadores de radiación X blanda; también se quiere estudiar y optimizar la inyección y amplificación de un haz de armónicos de alto orden al atravesar el plasma. El código ARWEN no está preparado para estas labores por lo que es necesario adaptar los datos de salida del código (como ya se explicó en el capítulo precedente) para poder usarlos como entrada de otros programas que nos permitan calcular las cantidades que deseamos, como pueden ser la ganancia y la energía extraída.

Las principales herramientas de postproceso de las que disponemos se explicarán en este capítulo. En primer lugar, hablaremos del cálculo de la ganancia y fluencia de saturación a partir de los datos de ARWEN usando un modelo atómico de tres niveles. En segundo lugar se hablará del código de trazado de rayos 3D SHADOX, que modela la propagación y amplificación del haz inyectado en el plasma.

4.2. Cálculo de la ganancia

El código ARWEN da como resultado diferentes parámetros hidrodinámicos que nos permiten caracterizar las propiedades del plasma amplificador. Se ha usado un modelo atómico de tres niveles que nos permite calcular a partir de estos datos hidrodinámicos, la ganancia de pequeña señal y la fluencia de saturación en la transición $2p_{\frac{1}{2}}^5 3s_{\frac{1}{2}} J = 1 \rightarrow 2p_{\frac{1}{2}}^5 3p_{\frac{1}{2}} J = 0$ en hierro neonioide Fe^{16+} , con una longitud de onda de $\lambda = 25,5nm$. Es sabido que este modelo sobreestima ligeramente la ganancia [54]. En nuestro modelo seguimos la asunción clásica de que el nivel fundamental (0) está mucho más poblado que los otros dos niveles involucrados en la transición. Existe una transición prohibida entre el nivel fundamental y el nivel superior de la transición láser (2) y además, el nivel inferior de la transición (1) se vacía rápidamente hacia el nivel fundamental (0), facilitando la creación de la inversión de población entre estos dos niveles (1,2) gracias a la excitación colisional, como se explica en [108]. Este fenómeno ha sido confirmando posteriormente en [31] demostrando que para las altas temperaturas que existen típicamente en el esquema de Excitación Colisional Transitoria (TCE) [61], la excitación colisional es el proceso dominante al poblar los niveles.

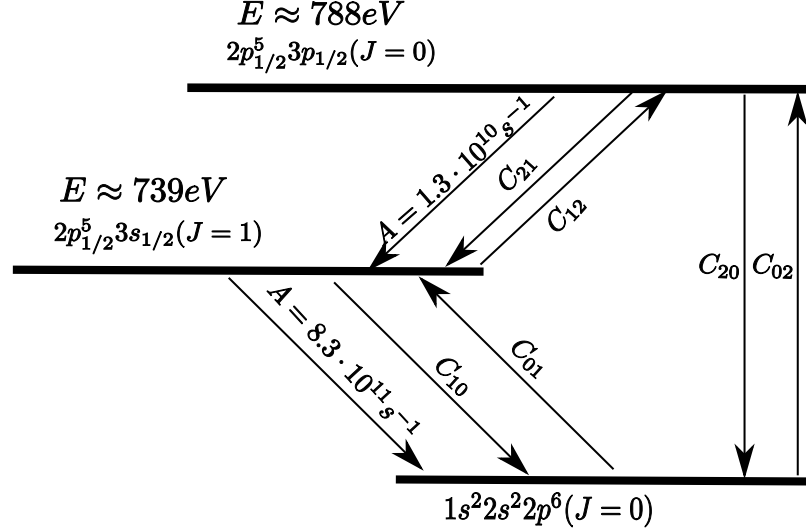


Figura 4.1: Esquema de Grotrian simplificado y transiciones obtenidas de [89, 50] para hierro neonioide.

El objetivo del modelo es calcular el coeficiente de ganancia de pequeña señal $g_0(\nu = \nu_0)$ y la fluencia de saturación $F_{sat}(\nu = \nu_0)$ en la frecuencia

central ν_0 de la raya:

$$g_0(\nu = \nu_0) = \left(N_2 - \frac{\gamma_2}{\gamma_1} N_1 \right) \sigma_{stim}(\nu = \nu_0) \quad (4.1)$$

$$F_{sat}(\nu = \nu_0) = \frac{h\nu_0}{\sigma_{stim}(\nu = \nu_0)} \quad (4.2)$$

En estas fórmulas, N_i y γ_i son respectivamente las poblaciones y degeneraciones del nivel i -ésimo de la transición y σ_{stim} la sección eficaz de emisión estimulada. Todos estos parámetros se calculan en el centro de la raya. Las poblaciones de los niveles se calculan resolviendo las ecuaciones de población estacionarias para tres niveles:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j C_{ij} n_e N_j + \sum_j A_{ij} N_i \quad (4.3)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = 0 \quad (4.4)$$

donde C_{ij} son las tasas de excitación colisional entre los niveles i y j , A_{ij} los coeficientes de emisión y absorción espontánea, N_i la población del nivel i y n_e la densidad electrónica. El signo positivo o negativo (es decir, si el nivel se puebla o se vacía) se incluye en los coeficientes.

Los mecanismos que se tienen en cuenta en nuestro modelo son la excitación colisional entre el nivel fundamental y los dos niveles de la transición láser ($0 \rightarrow 2, 0 \rightarrow 1$) y la desexcitación colisional y transiciones radiativas ($2 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0$). Las tasas de colisión electrónica usadas son las de Van Regemorter, descritas en [79], que dependen de la temperatura y densidad electrónica. Estas tasas asumen que los electrones tienen una distribución Maxwelliana de velocidades:

$$C_{ij} \approx 1,6 \times 10^{-5} \frac{f_{ij} \langle g \rangle}{\Delta E_{ij} \cdot \sqrt{kT_e}} e^{-\frac{\Delta E_{ij}}{kT_e}} \quad (4.5)$$

$$C_{ji} \approx \frac{\gamma_i}{\gamma_j} C_{ij} \cdot e^{\frac{\Delta E_{ij}}{kT_e}} \quad (4.6)$$

donde f_{ij} es la fuerza del oscilador, $\langle g \rangle$ el factor de Gaunt (que toma el valor $\langle g \rangle = 0,2$), ΔE_{ij} es la diferencia de energía entre los niveles i y j , k es la constante de Boltzmann y T_e la temperatura electrónica.

La sección eficaz de emisión estimulada se calcula mediante la fórmula

$$\sigma_{stim}(\nu) = \Phi(\nu) \frac{\lambda^2}{8\pi} A_{21} \quad (4.7)$$

donde A_{21} es el coeficiente de Einstein de la transición $2 \rightarrow 1$ y $\Phi(\nu)$ es la forma espectral de la línea. En nuestro modelo asumimos que la forma espectral de la línea viene dada por el ensanchamiento Doppler y ésta, por tanto, será una gaussiana. Al despreciar el ensanchamiento colisional, se reduce el ancho espectral de la línea, lo cual aumenta la ganancia y disminuye la fluencia de saturación [107]. Sin embargo, como se demuestra en [50], la máxima contribución al ensanchamiento de la línea viene dado por el efecto Doppler, por lo que nuestra asunción es suficientemente válida. Ya que calculamos el valor de la ganancia en el centro de la línea, necesitamos conocer $\Phi(0)$, que es el pico de una gaussiana:

$$\Phi_D(0) = \lambda \left(\frac{m}{2\pi k T_i} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.8)$$

donde m es la masa atómica de los iones responsables de la emisión, k la constante de Boltzmann y T_i la temperatura iónica.

Las simulaciones se han realizado con una versión del código ARWEN en la que se asume que el plasma se encuentra en Equilibrio Termodinámico Local (LTE), es decir, electrones e iones tienen la misma temperatura. Esta suposición ha sido validada en distintos experimentos y modelado en el caso de plasmas creados con pulsos de duración de nanosegundos (este esquema es conocido como el de Estado Quasi-Estacionario QSS). Esta suposición falla cuando se usan pulsos más cortos. En el caso del esquema TCE, donde se usa una combinación de pulsos de nanosegundo para crear el plasma y de picosegundos para bombearlo, la ganancia aparece después de la interacción con el pulso corto, ya que la temperatura electrónica habrá aumentado dramáticamente mientras que la iónica se ha mantenido constante. Por tanto, se ha calculado la ganancia usando como temperatura iónica la temperatura antes de la llegada del pulso de picosegundos y como temperatura electrónica la temperatura en el momento de la interacción con el láser corto.

4.3. El Código SHADOX

El código SHADOX es un código de ray-tracing 3D en el que se simula la interacción de un haz de radiación luminosa con un plasma amplificador [71, 56]. Éste código ha sido acoplado con ARWEN, utilizando como datos de entrada la densidad electrónica (obtenida directamente de ARWEN) y la ganancia y la fluencia de saturación calculadas con el modelo explicado anteriormente.

SHADOX divide el haz incidente en un número de rayos indicado por el usuario y los propaga a través del plasma. Como la salida de ARWEN es

2D, la propagación del haz se realiza a través de copias de dicho mapa de densidad.

El haz incidente se considera gaussiano y la trayectoria de cada rayo se calcula con la aproximación paraxial. En las siguientes secciones se hará un breve resumen sobre las propiedades de haces gaussianos y de la aproximación utilizada para finalmente describir el código SHADOX.

4.3.1. La aproximación paraxial

En el caso de estudio (óptica geométrica, haz láser) se puede usar, para describir los rayos, la aproximación paraxial. Al ser la propagación aproximadamente unidimensional (dirección que llamaremos z), podemos describir los rayos con dos parámetros: su distancia $r(z)$ al eje z y su pendiente

$$r'(z) = \frac{dr}{dz}$$

Al asumir la propagación unidimensional, la pendiente se puede aproximar como

$$r'(z) = \tan \theta \approx \sin \theta \approx \theta$$

Así pues, el rayo está completamente caracterizado por el vector

$$\begin{bmatrix} r_i \\ r'_i \end{bmatrix}$$

En general, se puede relacionar el rayo después de atravesar un elemento óptico con el rayo inicial mediante una matriz:

$$\begin{bmatrix} r_f \\ r'_f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A & B \\ C & D \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_i \\ r'_i \end{bmatrix}$$

Donde la matriz toma diferentes valores dependiendo del elemento óptico. Como ejemplo, la matriz $ABCD$ para una lente fina de longitud focal es f

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1/f & 1 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Estas matrices también pueden ser usadas para calcular los efectos de elementos ópticos en haces gaussianos y no solo en rayos.

La ecuación de ondas paraxial

Aunque la aproximación de rayos de la óptica geométrica es muy útil, conviene deducir la ecuación de ondas en la aproximación paraxial para poder estudiar las propiedades de los haces gaussianos.

La ecuación de ondas para el campo eléctrico en el vacío es:

$$\nabla^2 E(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} E(\mathbf{r}, t) = 0$$

Suponiendo soluciones monocromáticas ($E(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}(\mathbf{r}) \exp(-i\omega t)$) se obtiene una ecuación de Helmholtz

$$\begin{aligned} \nabla^2 \mathcal{E}(\mathbf{r}) + k^2 \mathcal{E}(\mathbf{r}) &= 0 \\ k^2 &= \frac{\omega^2}{c^2} \end{aligned}$$

Ensayando una solución que se transmita predominantemente en una dirección ($\mathcal{E}(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_0(\mathbf{r}) \exp(ikz)$ y suponiendo que

$$\begin{aligned} \lambda \left| \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial z} \right| &<< |\mathcal{E}_0| \\ \lambda \left| \frac{\partial^2 \mathcal{E}_0}{\partial z^2} \right| &<< \left| \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial z} \right| \end{aligned}$$

se obtiene la ecuación de ondas paraxial:

$$\nabla_T^2 \mathcal{E}_0 + 2ik \frac{\partial \mathcal{E}_0}{\partial z} = 0 \quad (4.10)$$

donde el laplaciano transversal es

$$\nabla_T^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

4.3.2. Haces Gaussianos

En óptica, un haz gaussiano es un haz de radiación electromagnética cuyo campo eléctrico transversal sigue una distribución gaussiana. La función matemática que describe a un haz gaussiano es una solución de la ecuación paraxial. Ésta solución representa la amplitud compleja del campo eléctrico.

Una característica fundamental de los haces gaussianos es que, cuando uno de estos haces es refractado por una lente, se convierte en otro haz gaussiano, con diferentes parámetros.

En la figura 4.2 se pueden observar los diferentes parámetros que definen un haz gaussiano:

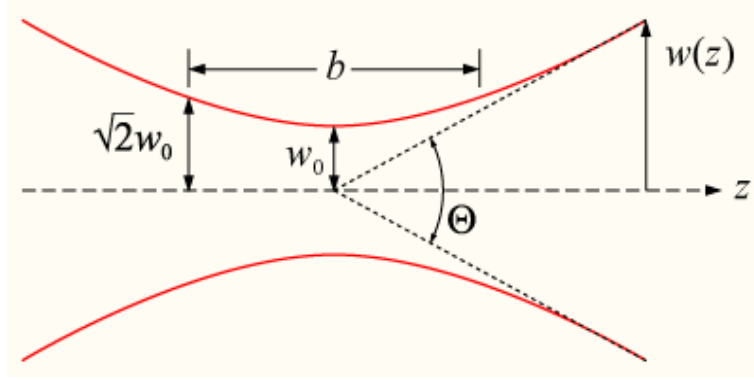


Figura 4.2: Parámetros de un haz gaussiano.

- *Beam waist* w_0 : valor mínimo del ancho del haz.
- *Spot size* w : ancho del haz. Se relaciona con el *beam waist* así:

$$w(z) = w_0 \sqrt{1 + z^2/z_0^2}$$

- *Rayleigh range* z_0 : valor de z en el que se cumple $w(z_0) = w_0\sqrt{2}$. Es una medida de la longitud de la región del *beam waist*. Su valor es $z_0 = \pi w_0^2/\lambda$
- *Radio de curvatura* R : radio de curvatura de los frentes de onda que limitan el haz. $R(z) = z(1 + z_0^2/z^2)$

La ley ABCD para haces gaussianos

Al ser un haz gaussiano una solución de la ecuación paraxial, las matrices asociadas a elementos ópticos pueden usarse para expresar el efecto de estos elementos en el haz gaussiano.

Su uso no es tan simple como la multiplicación matriz-vector que se hacía en el caso de un rayo, pero las variaciones sufridas por los diferentes parámetros de un gaussiano se pueden expresar en términos de los elementos de dichas matrices. Como ejemplo, a través de una lente delgada, el parámetro q definido como

$$\frac{1}{q(z)} = \frac{1}{R(z)} + \frac{i\lambda}{\pi w^2(z)}$$

se transforma como

$$q_f = \frac{Aq_i + B}{Cq_i + D}$$

donde A, B, C, D son los elementos de la matriz de una lente delgada 4.9

Aproximación paraxial, haces gaussianos y su transformación a través de lentes son los elementos que se usan en SHADOX para calcular la trayectoria del haz inyectado.

4.3.3. El código SHADOX

Como ya se ha explicado anteriormente, este código simula la inyección de un haz gaussiano en un plasma amplificador. Podríamos dividir la física de este código en tres partes: la inyección, donde el haz se focaliza con una serie de lentes, la transmisión a través del plasma (medio no homogéneo ya que el índice de refracción varía) y la amplificación.

Inyección del haz

El usuario define la energía, longitud de onda y área del haz gaussiano a inyectar en el plasma, así como los parámetros de dos lentes que pueden enfocar el haz en las dos direcciones perpendiculares a la dirección de desplazamiento. También se puede variar el ángulo de inyección del plasma (que es un parámetro que ayuda a atenuar los efectos de refracción del haz en el plasma). Los cálculos necesarios se realizan con los métodos expuestos en las secciones anteriores.

Transmisión a través del plasma

Una vez definido el haz en la superficie del plasma, éste se va propagando calculando la variación del ángulo de cada rayo en cada celdilla computacional, teniendo en cuenta tanto la variación producida por la divergencia del haz gaussiano como la debida a los gradientes de densidad electrónica. Subrutinas especiales de interpolación son necesarias para calcular el gradiente [56].

Amplificación

La amplificación se calcula usando la ganancia de pequeña señal g_0^{ss} y la fluencia de saturación F_{sat} calculadas por ARWEN para calcular la ganancia teniendo en cuenta la saturación (ver ecuación 2.62). El cociente entre la energía saliente y la entrante en una celda es la exponencial del coeficiente de ganancia por la longitud recorrida en dicha celda.

$$\frac{E_{out}}{E_{in}} = \exp(g_0 \cdot l) \quad (4.11)$$

Con esto puede calcularse la energía amplificada en dicha celda, aumentando la energía del rayo.

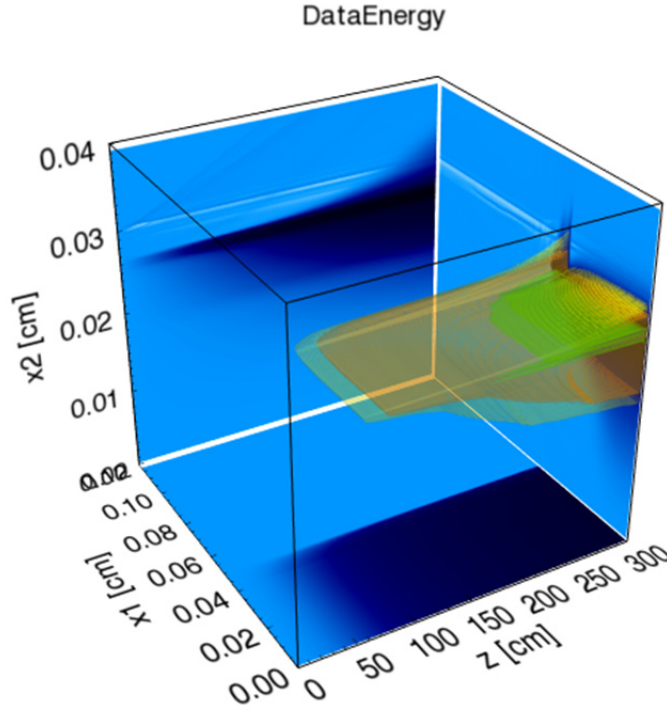


Figura 4.3: Haz amplificado en un plasma de 1 mm de ancho, simulado con SHADOX. El eje de simetría se encuentra en $X_1 = 0,0$. El haz amplificado avanza en el sentido de Z creciente. Figura obtenida de [56].

4.4. Conclusiones

En el capítulo 3 se explicaron las capacidades del código ARWEN y las mejoras introducidas en él en el marco de esta tesis. Sin embargo, tratar todos los procesos físicos que tienen lugar en la optimización de amplificadores XUV está fuera del alcance de un único código, debido a su complejidad y coste computacional. Por ello es necesario postprocesar los datos obtenidos con el código ARWEN para poder estudiar la amplificación de los haces al atravesar las columnas de plasma.

En este capítulo se han descrito los dos códigos que han sido acoplados con ARWEN. En primer lugar se ha explicado un modelo atómico de tres

niveles que permite calcular, de manera muy simplificada, la ganancia, fluencia de saturación, ensanchamientos de la línea, etc ... a partir de los datos hidrodinámicos de ARWEN. La salida de esta subrutina puede ser usada como entrada del código SHADOX. Éste es un código de trazado de rayos 3D que, en la aproximación paraxial, estudia el transporte y la amplificación de la radiación XUV en el plasma.

Capítulo 5

Efectos 2D: Trabajos previos

5.1. Introducción

Las simulaciones realizadas en el marco de esta tesis no han partido desde cero, si no que han sido un paso más hacia delante en el campo de la optimización de los amplificadores de radiación XUV coherente. En concreto, los principales antecedentes se encuentran en la tesis doctoral de K. Cassou [12, 14]. En este trabajo preeliminar, se optimizó usando el código ARWEN el perfil espacial del láser, estudiando los fenómenos físicos relacionados. Hecha esta optimización, se procedió, ya en esta tesis, a estudiar el impacto del tamaño del plasma en las propiedades amplificadoras de éste.

Se ha creído conveniente, para tener una visión conjunta de la influencia de los distintos parámetros a optimizar y de la física subyacente, incluir un capítulo recogiendo estos trabajos de optimización. Así pues, los resultados y figuras presentados en este capítulo están extraídos de la tesis doctoral [12] con permiso de su autor. En el siguiente capítulo se expondrá el trabajo de simulación propio de esta tesis.

5.2. Optimización del perfil espacial del láser

Los amplificadores de radiación X coherente, basados en plasmas creados a partir de blancos sólidos, son fuertemente anisótropos, debido a las características de la creación y evolución del plasma. En la figura 5.1 se muestra un esquema de las simulaciones junto con el sistema de coordenadas utilizado. Al ser el código ARWEN bidimensional, se simulará únicamente el plano X-Y, considerando el plasma infinito en la dirección Z. Intuitivamente, se entiende que la dimensión *vertical* del plasma (dirección Y en nuestras simulaciones) viene dada por la expansión del plasma, mientras que la dimensión

horizontal estará controlada por el perfil espacial del láser y la expansión lateral del plasma. Es importante tener en cuenta estos efectos ya que la máxima longitud de propagación de un haz inyectado en el plasma es, con ciertas aproximaciones, inversamente proporcional al gradiente de densidad electrónica en la dirección Y.

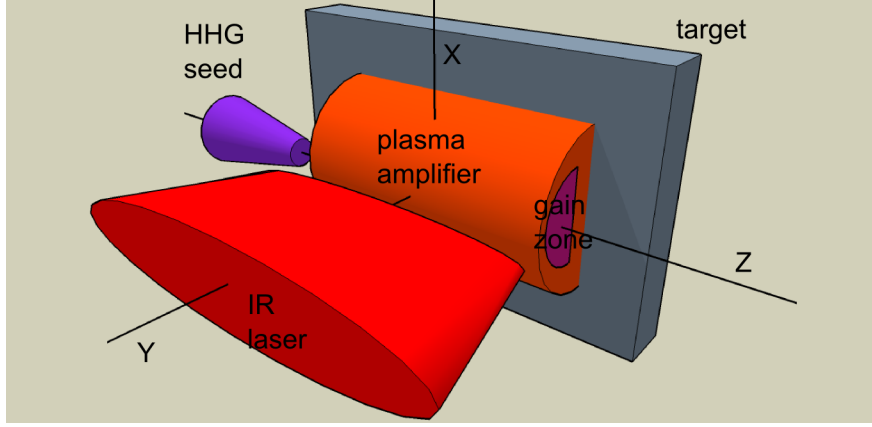


Figura 5.1: Esquema de las simulaciones y del sistema de coordenadas usado

El uso de pre-impulsiones permite reducir dichos gradientes y aumentar la absorción del láser principal en la zona donde se creará la ganancia, permitiendo que ésta ocupe una mayor superficie. Sin embargo, controlar el tamaño del plasma en la dirección Y implica actuar sobre la dinámica del plasma (el tamaño vertical del plasma depende de los mecanismos de expansión e indirectamente de la energía e intensidad del láser). Así pues, el parámetro más sencillo a controlar, a priori, es la extensión horizontal del plasma ya que ésta depende fuertemente de la línea focal del láser en el eje X.

En [12] (y de manera resumida en [14]) se estudia la influencia del perfil espacial transversal de la línea focal del láser en las propiedades hidrodinámicas del plasma, siendo dichas referencias parte de los antecedentes de esta tesis. Es por ello que el resto de esta sección (textos e imágenes) se ha obtenido de [12] con permiso de su autor.

La distribución típica de los sistemas láser de potencia varía entre gaussianos y super-gaussianos (ver fórmula 5.1) de diferente orden ($2 \leq n \leq 10$).

$$I = I_0 \exp \left[-y^2 / (2\sigma^2) \right]^n \quad (5.1)$$

En esta ecuación, I es el parámetro que sigue esta distribución (energía o intensidad), I_0 el valor máximo de dicho parámetro, σ la varianza y n el orden. Las dimensiones típicas de los plasmas amplificadores varían entre $30\mu m$ y

5.2. OPTIMIZACIÓN DEL PERFIL ESPACIAL DEL LÁSER

$100\mu m$ para la dirección transversal x y entre 4 mm y 10 mm para la dirección longitudinal z , que es la dirección de propagación del haz a amplificar.

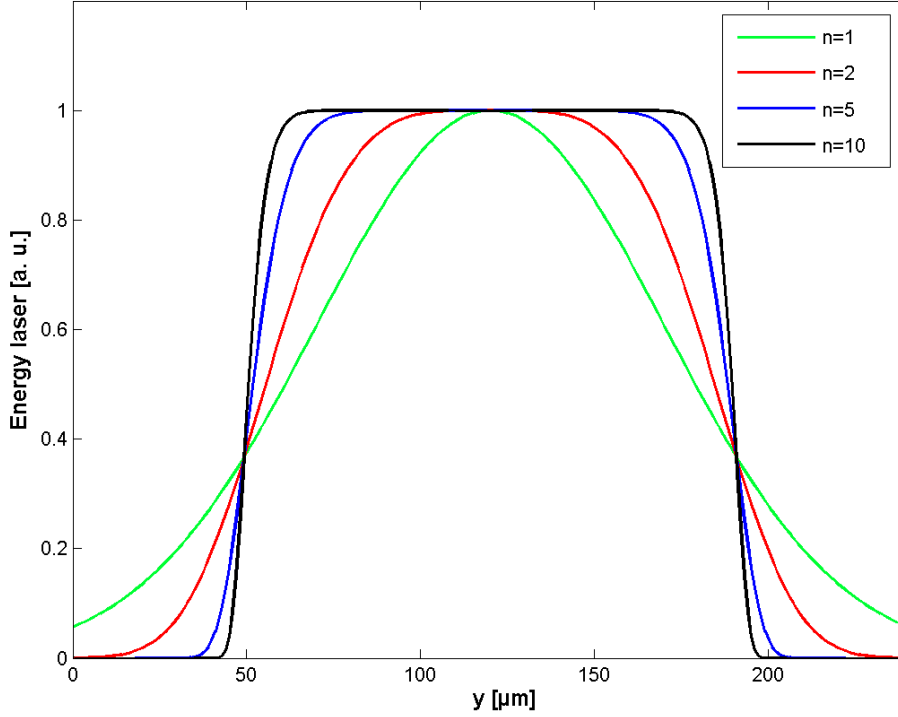


Figura 5.2: Perfil espacial transversal de la línea focal del láser en el plano definido por la superficie del blanco. Para $n = 1$ se tiene un perfil gaussiano y para $n = 10$ uno super-gaussiano.

En [12], se varió el perfil espacial del láser para tratar de minimizar los efectos de refracción y obtener plasmas más homogéneos. El láser fue modelizado con una distribución super-gaussiana en la que se variaba el orden n . Para $n = 1$ se obtiene un perfil gaussiano. El orden de la distribución se varió entre $n = 1$ y $n = 10$ (como se muestra en la figura 5.2) Los parámetros que se usaron en dichas simulaciones se basan en las propiedades de los haces láser producidos con dispositivos Ti:Sa ($\lambda = 800nm$). Estos parámetros se indican en la tabla 5.1.

Cuadro 5.1.: Parámetros de los láseres utilizados en las simulaciones.

	τ duración [ps]	h_x (FWHM) [μm]	E_L Densidad lineal de energía [J.m^{-1}]	I Intensidad [W.cm^{-2}]
Impulsión larga	400	15-300	60-800	1×10^{12}
Impulsión corta	5	15-300	60-800	8×10^{13}

5.2.1. Efectos del orden n

En la figura 5.3 se representa la distribución de densidad electrónica de un plasma creado por una impulsión láser con un perfil espacial hiper-gaussiano con FWHM de $100\mu m$ y de intensidad $I = 1 \times 10^{12} W \cdot cm^{-2}$, $100ps$ después de la llegada del máximo del pulso láser, variando el orden n del hiper-gaussiano.

A primera vista se observa que el perfil de densidad según la dirección x viene dado por el perfil del haz láser. La expansión del plasma en la dirección y es similar en los tres casos. Los gradientes transversales de densidad electrónica $\nabla_y n_e$ disminuyen en la región donde se producirá la inversión de población ($n_e \geq 1 \times 10^{20} cm^{-3}$ cuando n aumenta. La estructura del plasma es pues completamente diferente. En el caso gaussiano, la energía contenida en las alas del perfil crea otras regiones de plasma alrededor de la región central y densa del plasma. A medida que el orden n del perfil aumenta, los plasmas en los bordes se vuelven cada vez más pequeños y fríos. Cuando se usan perfiles super-gaussianos, los plasmas que aparecen en los bordes son creados por la radiación X emitida por la parte central del plasma. Estos plasmas conducirán a la formación de *jets* de plasma.

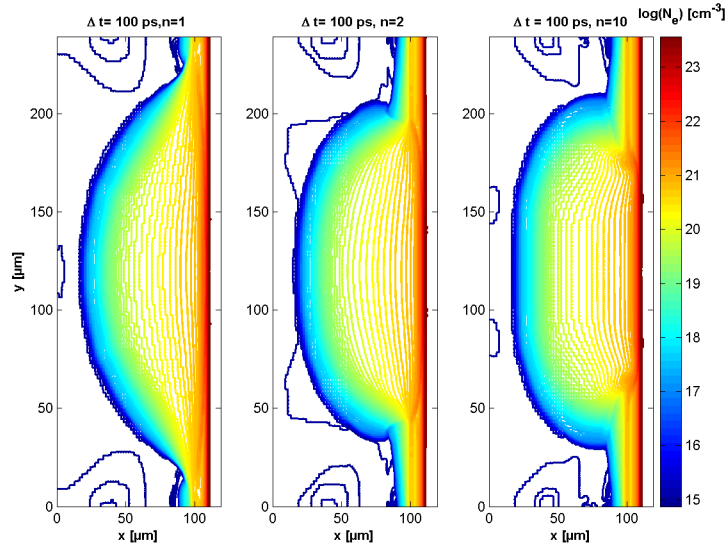
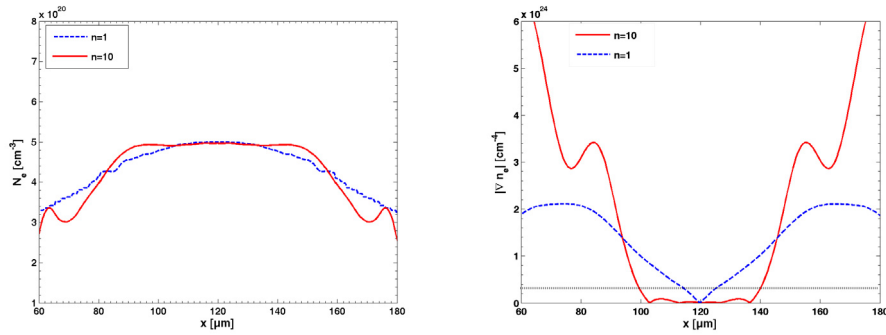


Figura 5.3: Mapas de densidad electrónica para $t = 100ps$ después de la llegada del máximo de la impulsión, en función del orden n . El orden aumenta de izquierda a derecha $n = 1, 2, 10$.

Los gradientes de densidad electrónica transversales medios para las densidades $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3} \geq n_e(x) \geq 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ tienen los siguientes valores: $\langle \nabla_x n_e \rangle \approx 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-4}$ para $n = 10$ y $\langle \nabla_x n_e \rangle \approx 6 \times 10^{24} \text{ cm}^{-4}$ para $n = 1$. Así pues, se tiene una zona densa en el pre-plasma donde la refracción del haz a inyectar y amplificar será mínima. En concreto, los gradientes disminuyen en el caso $n = 1$ cuando nos alejamos del blanco, acercándonos a la corona del plasma. Este no es el caso para $n = 10$ donde ocurre lo contrario. Se observa igualmente que, si bien los gradientes de densidad son menos elevados en la parte central del plasma para $n = 10$, los gradientes en los bordes son muchísimo más grandes en este caso: $\langle \nabla_y n_e \rangle > 10^{24} \text{ cm}^{-4}$.



(a) Corte de densidad electrónica según el eje x (b) Corte según el eje x del gradiente de densidad electrónica

Figura 5.4: Comparación de los perfiles y gradientes de densidad electrónica para $n = 1$ (línea de puntos) y $n = 10$ (línea sólida) para $n_e(y) = 5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. a) Densidad electrónica $n_e(y)$ y b) gradientes de densidad electrónica $\nabla_x n_e(x)$ correspondientes

Observando zonas con una densidad fija según el eje y , podemos explicar este comportamiento mediante cortes de la distribución espacial de densidad electrónica (fig. 5.4(a)). Veremos que el aumento de la homogeneidad del índice de refracción en la zona de ganancia depende del retraso respecto al máximo de la impulsión larga.

Los gradientes de densidad electrónica están representados en la figura 5.4(b). La línea de puntos negra representa el valor máximo aceptable del gradiente de densidad electrónica ($\langle \nabla_x n_e \rangle < 6 \times 10^{23} \text{ cm}^{-4}$) para que el haz a amplificar se propague al menos 2 mm en el plasma, suponiendo que la extensión de la zona de ganancia según el eje y es de $20 \mu\text{m}$ y que el perfil de densidad electrónica según dicho eje lo permita ($\langle \nabla_x n_e \rangle < 1,5 \times 10^{23} \text{ cm}^{-4}$). Se observan también en los cortes de densidad y gradientes para $n = 10$ la presencia de los jets para $x = 62 \mu\text{m}$ y $x = 168 \mu\text{m}$.

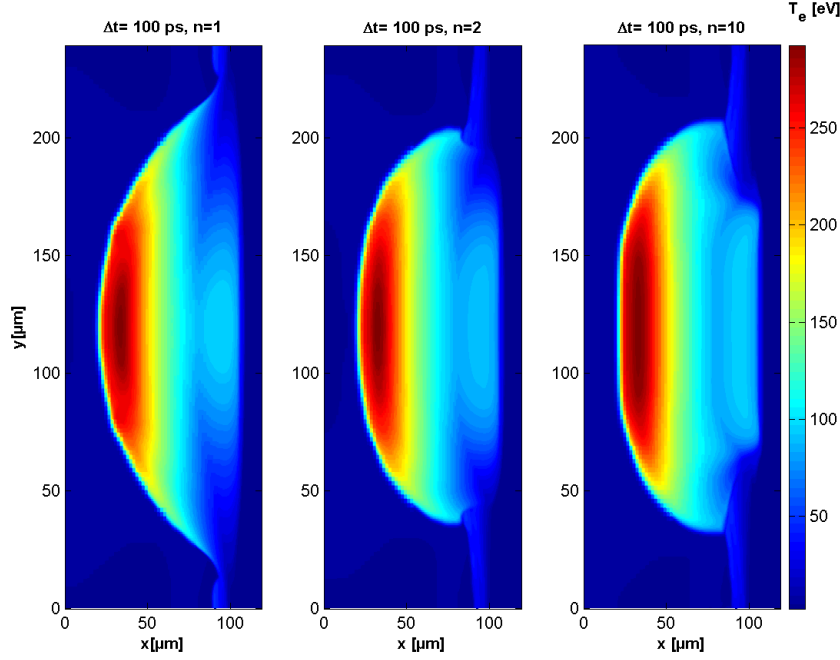


Figura 5.5: Mapas de temperatura del plasma para $t = 100ps$ después de la llegada del pico de la impulsión en función del orden n . El orden aumenta de izquierda a derecha $n = 1, 2, 10$.

El perfil de temperaturas del pre-plasma sigue la forma de la línea focal del láser, tal y como se observa en la figura 5.5. Dentro de la región densa del plasma, la temperatura es muy homogénea en el caso super-gaussiano: en una distancia transversal de $90\mu m$ la temperatura varía entre $93eV$ y $88eV$. En el caso gaussiano, solo encontramos temperaturas superiores a $90eV$ en $40\mu m$. Sin embargo esta longitud aumenta hasta $55\mu m$ para $n = 2$ y alcanza más de $70\mu m$ para $n = 10$. Si se comparan los cortes según el eje x de la temperatura correspondiente a una densidad electrónica de $n_e = 5 \times 10^{20} cm^{-3}$, mostrados en la figura 5.6, se observa que la temperatura presenta un *plateau* de una longitud de más de $70\mu m$ en el caso del perfil super-gaussiano, mientras que en el caso gaussiano, no hay ningún tipo de plateau, ya que la zona en la que la temperatura varía menos de $10eV$ es de unos $40\mu m$ de media.

Como el cálculo de la ionización media se realiza suponiendo Equilibrio Termodinámico Local (ETL), ésta varía con la temperatura. Así pues, la abundancia de iones Fe^{16+} será más homogénea en el caso de perfiles super-gaussianos.

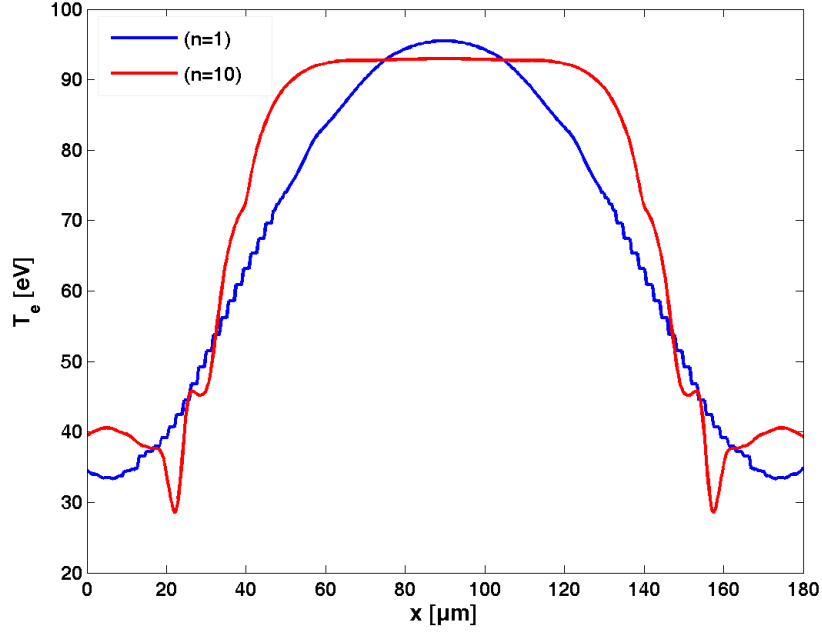


Figura 5.6: Cortes transversales, según el eje x , de la distribución de la temperatura en la zona de $n_e = 5 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ para $n = 1$ (línea azul) y $n = 10$ (línea roja).

5.2.2. Evolución temporal

La evolución temporal del pre-plasma ha de ser tomada en cuenta de cara a la optimización del retraso entre el pulso principal y el corto. Por ello es conveniente estudiar las estructuras bidimensionales producidas por los diferentes perfiles de deposición de energía del láser.

En el caso de $n = 1$, representado en la figura 5.8(b), la estructura del plasma alrededor del eje óptico del láser ($x = 120 \mu\text{m}$) no cambia. En efecto, el perfil transversal de densidad evoluciona poco en lo concerniente a su forma, como se observa en la figura 5.8(b). El plasma se ensancha pero los gradientes transversales de densidad son equivalentes durante unos 600 ps. Respecto a la temperatura del plasma, esta se reduce de 90 eV en el momento del máximo de la impulsión a 40 eV en $t = 600 \text{ps}$, debido a la conducción térmica y al enfriamiento por radiación. La temperatura tiende pues a homogeneizarse entre la parte central del plasma y los bordes.

5.2. OPTIMIZACIÓN DEL PERFIL ESPACIAL DEL LÁSER

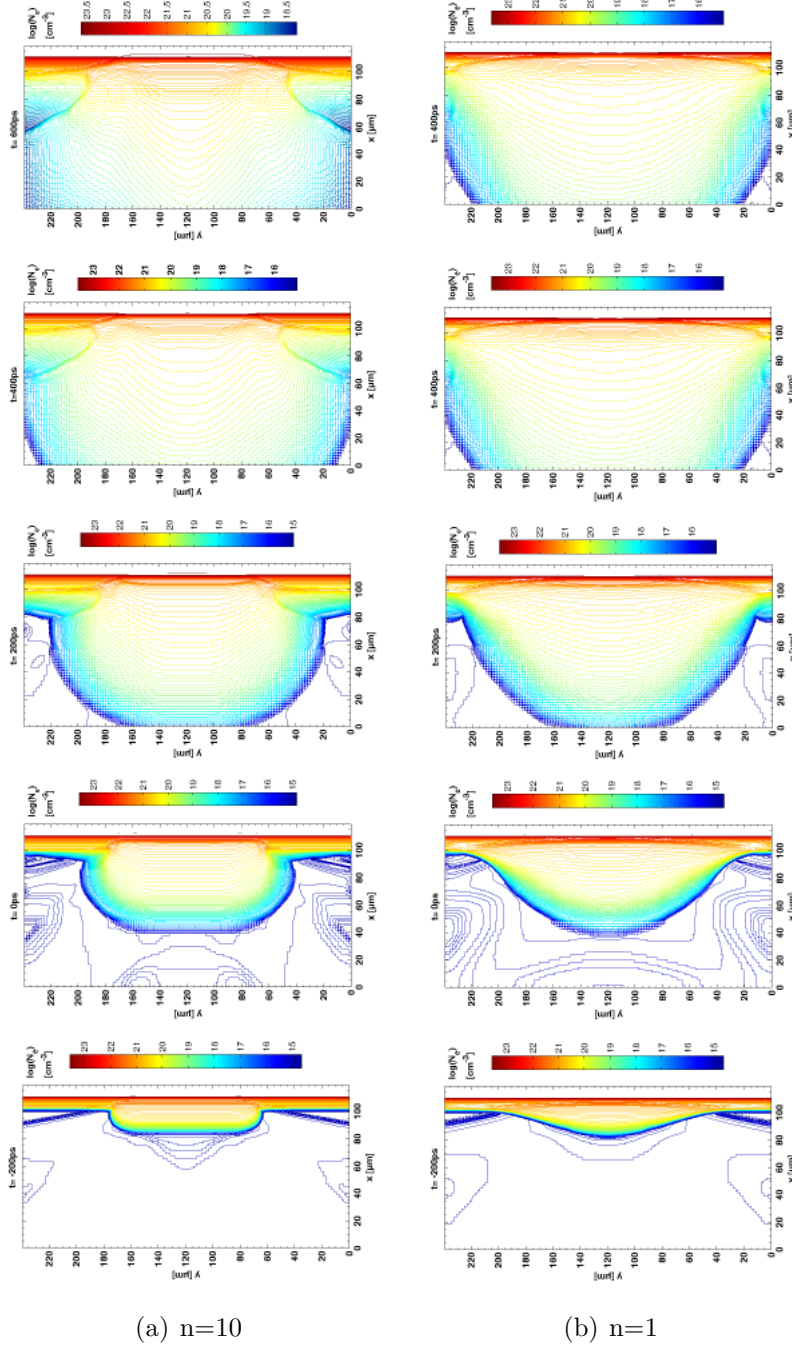


Figura 5.7: Evolución temporal de la densidad del pre-plasma para diferentes instantes $-200, 0, 200, 400, 600 \text{ ps}$. El origen de tiempos es la llegada del pico de la impulsión láser larga. Se muestran dos perfiles transversales diferentes de línea focal: $n = 1$ y $n = 10$. La escala de colores cambia entre las figuras.

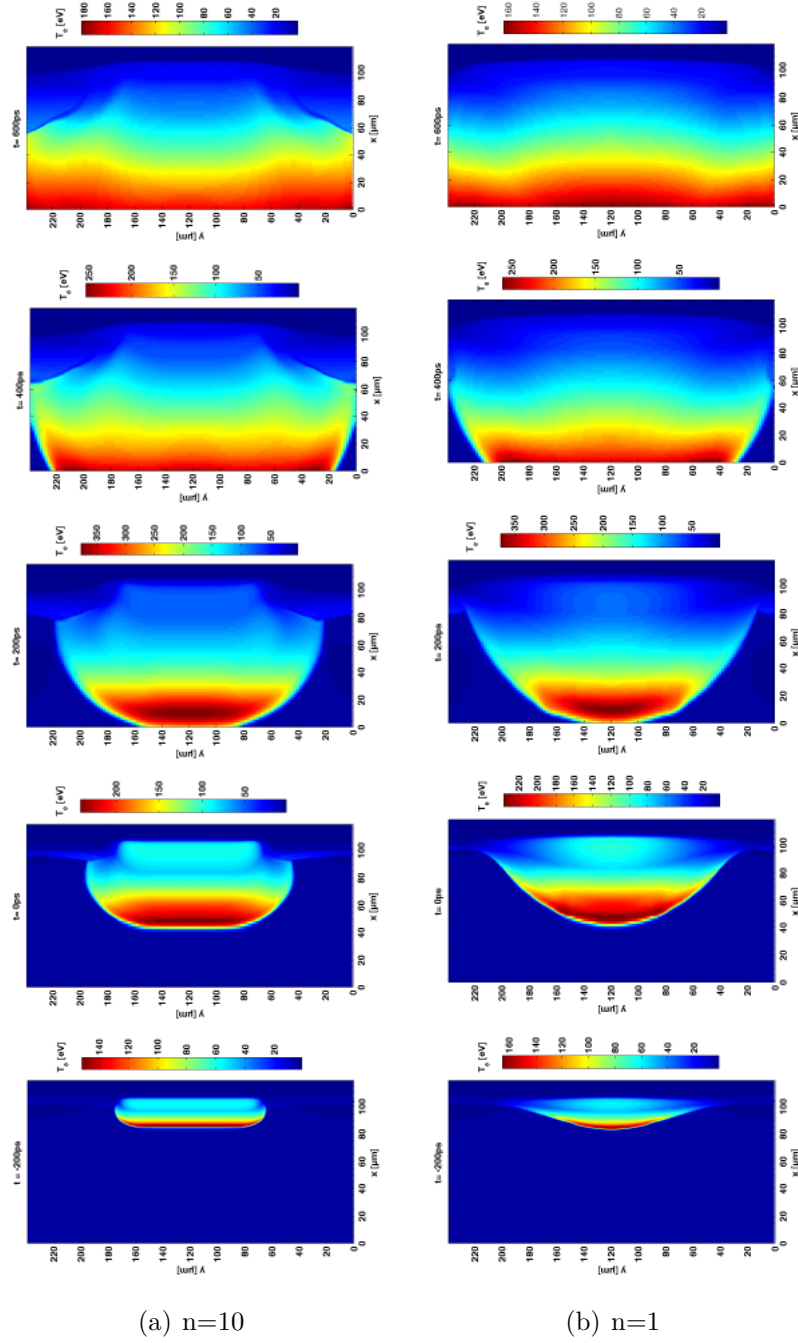


Figura 5.8: Evolución temporal de la temperatura del pre-plasma para diferentes instantes $-200, 0, 200, 400, 600$ ps. el origen de tiempos es la llegada del pico de la impulsión láser larga. Se muestran dos perfiles transversales diferentes de línea focal: $n = 1$ y $n = 10$. La escala de colores cambia entre las figuras.

En el caso de $n = 10$, representado en la figura 5.8(a), y durante las primeras centenas de picosegundos, la estructura del plasma mimetiza el perfil de irradiación del láser. La densidad presenta un plateau en la región densa del plasma. Este plateau de densidad evoluciona de manera muy diferente en la dirección y . En las zonas densas, en la vecindad de la densidad crítica, el plateau se mantiene extenso ($\approx 70\mu m$) hasta aproximadamente 200 ps después de la llegada de la impulsión láser. A partir de 100 ps después del máximo de la impulsión, aparecen jets en las zonas laterales del plasma. La estructura de la densidad electrónica del plasma toma una forma particular. Cuanto más lejos del blanco, más se reduce la densidad entre el plateau y los jets. Una observación más precisa de las estructuras laterales del plasma permite llegar a la conclusión de que el plasma fluye hacia el gas débilmente ionizado presente en los bordes del plasma. Los gradientes de temperatura son muy importantes al comienzo de la interacción, particularmente en la región densa del plasma. Sin embargo, al ser los gradientes de densidad elevados, la difusión térmica se reduce fuertemente. De hecho se observa que los jets densos de plasma presentes en sus laterales tienen una temperatura relativamente baja ($T_e < 30eV$).

La temperatura en la región subcrítica disminuye y el perfil transversal de temperatura se mantiene supergaussiano con modulaciones que aumentan con el tiempo en los bordes del plasma. Comparando el caso gaussiano y el supergaussiano, las temperaturas en la región subcrítica son equivalentes.

5.2.3. Distribución de velocidades y estructuras laterales

Cuando se estudia la distribución de la componente x de las velocidades, representadas en la figura 5.9, se observa que en el caso de un perfil super-gaussiano, únicamente los bordes del plasma tienen componente x de la velocidad. La posición del jet (que es una discontinuidad en la distribución de densidad) corresponde igualmente a una discontinuidad de la distribución de la componente v_x igualmente.

Esta discontinuidad se produce a su vez en el caso $n = 1$ pero para tiempos más largos. Para $t = 400ps$ después de la llegada del pico del pulso, aparecen en los laterales del plasma una discontinuidad en las velocidades v_x , correspondientes a la colisión del plasma central en expansión y de los plasmas creados en los bordes por la emisión X de la región central.

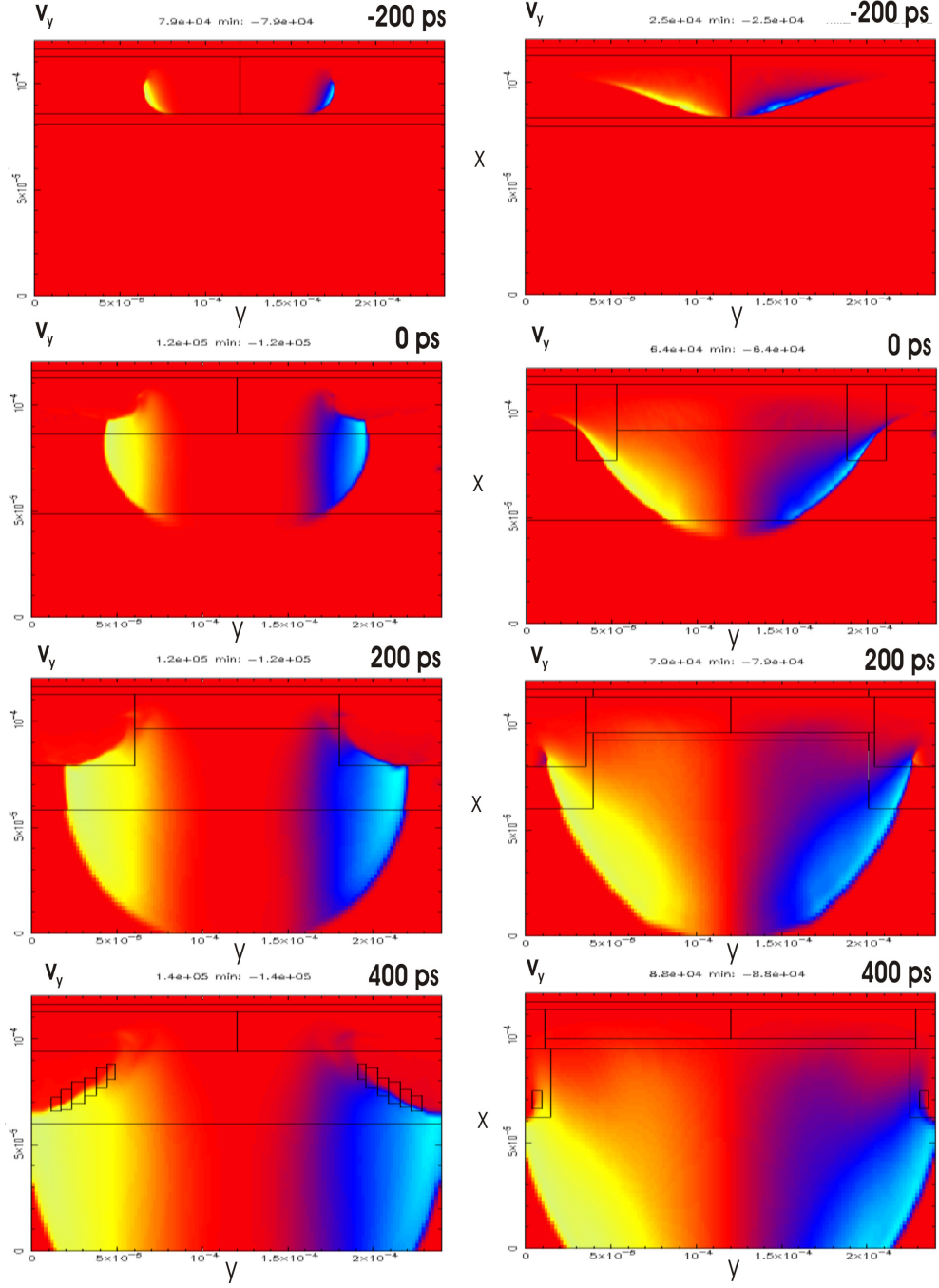


Figura 5.9: Comparación de las velocidades laterales v_x en distintos instantes ($-200, 0, 200, 400ps$). El orden es $n = 10$ para las figuras de la izquierda y $n = 1$ para las de la derecha. La velocidad $v_x \approx 0$ está indicada en color rojo, $v_x < 0$ corresponde al amarillo y $v_x > 0$ al azul.

5.2. OPTIMIZACIÓN DEL PERFIL ESPACIAL DEL LÁSER

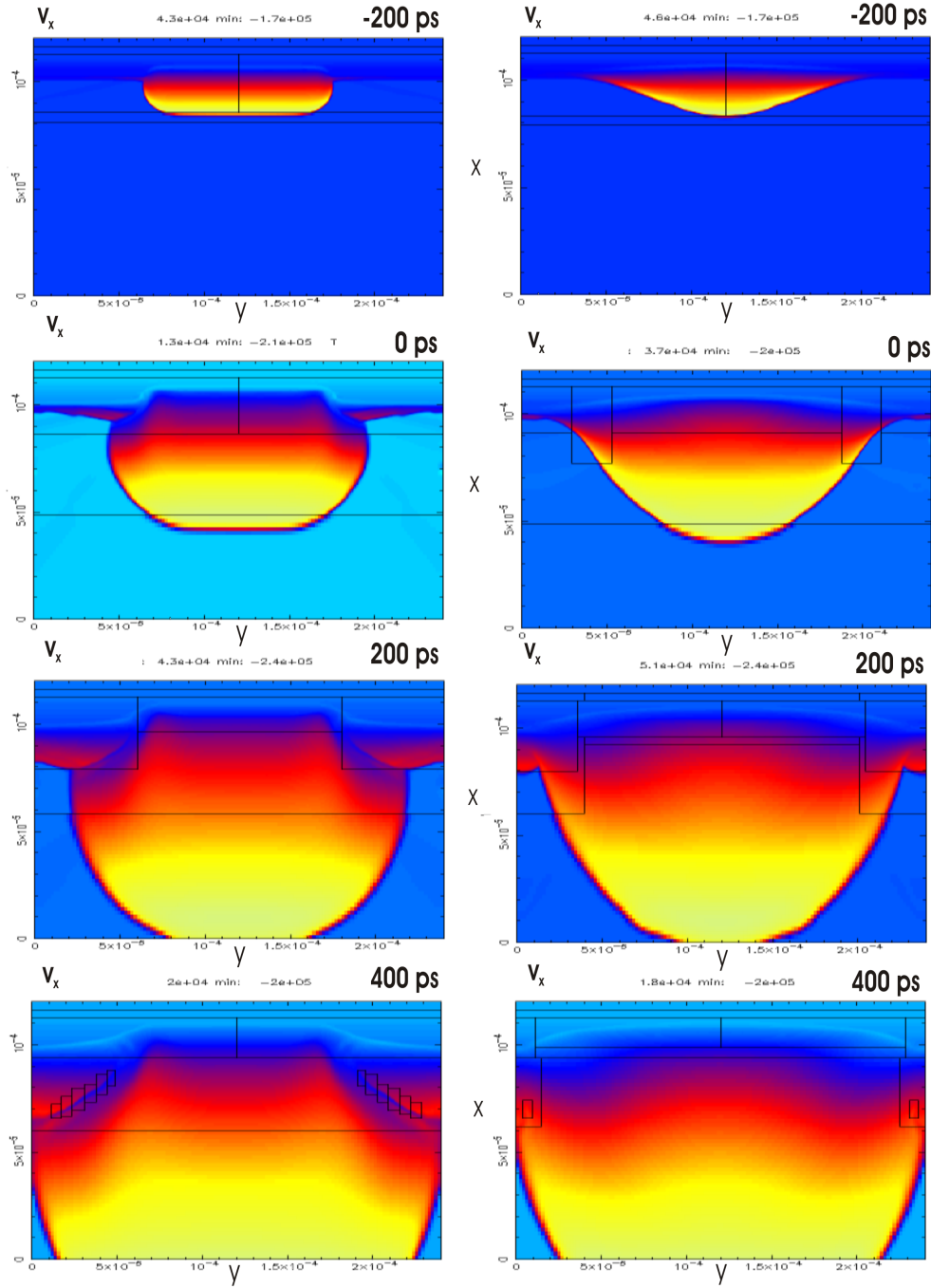


Figura 5.10: Comparación de las velocidades axiales v_y en distintos instantes ($-200, 0, 200, 400$ ps). El orden es $n = 10$ para las figuras de la izquierda y $n = 1$ para las de la derecha. La velocidad $v_y \approx 0$ está indicada en color azul, $v_y < 0$ corresponde al amarillo y $v_y > 0$ al rojo.

La distribución de velocidades verticales está representada en la figura 5.10. Los valores son similares para los dos perfiles $n = 1$ y $n = 10$. Sin embargo la velocidad según el eje y es más débil en los jets. Por lo tanto existe un efecto cizalla entre la parte central del plasma, que tiene una velocidad alta, y los plasmas formados en los bordes por la radiación X.

En resumen, la forma del perfil espacial transversal de la línea focal tiene un efecto muy importante en la estructura del plasma y su evolución. A partir de los resultados de simulación, se mostrará que para aumentar transversalmente la región de amplificación, el perfil super-gaussiano es más apropiado.

5.2.4. Efecto de la dimensión transversal de la línea focal

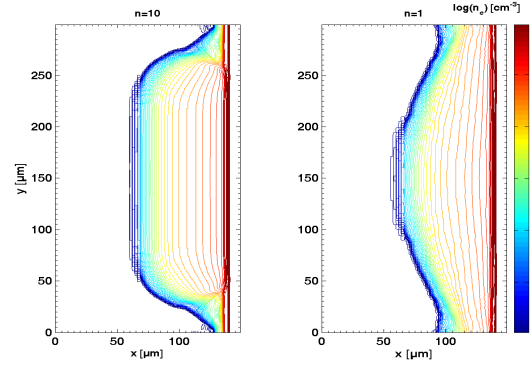
El objetivo de este estudio es comprender los efectos bidimensionales que aparecen en el plasma en función del ancho de la línea focal. En el marco de la inyección de armónicos, la superficie de amplificación es un parámetro muy importante. Por tanto, se estudiará la estructura del plasma formado por la impulsión larga en función del parámetro h_x , ancho de la línea focal.

Se han realizado dos series de simulaciones del pre-plasma para $n = 1$ y $n = 10$ para dos FWHM correspondientes a dos casos extremos : $15\mu m$ y $300\mu m$ y se han representado en tres instantes distintos respecto a la llegada del pico de la impulsión láser.

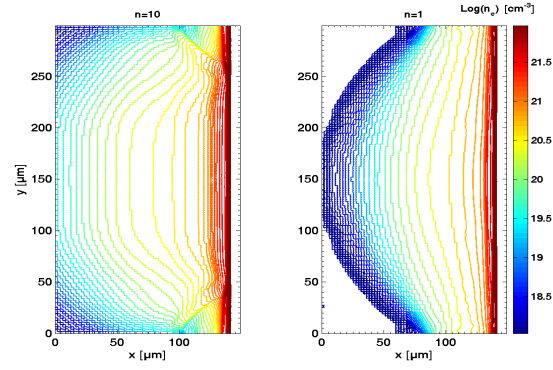
Las figuras 5.11(a), 5.11(b), 5.11(c) muestran los mapas de densidad electrónica del plasma para los distintos instantes estudiados, con $n = 1$ y $n = 10$. En el momento de la llegada del pico de la impulsión, la zona homogénea en densidad según el eje x (es decir, la zona con gradientes de densidad reducidos) corresponde a un ancho de $\approx 0,7 \times h_x$ en el caso de $n = 10$. En el caso gaussiano, $n = 1$ se obtiene $\approx 0,5 \times h_x$. Estos valores se corresponden a las observaciones hechas con un FWHM de $h_x = 100\mu m$.

Se observa que en el caso $n = 10$ las estructuras laterales del plasma evolucionan rápidamente. Para un tiempo $t = 200ps$ después de la llegada del pico de la impulsión, para $x = 60\mu m$ y $x = 240\mu m$, la densidad cae brutalmente en los bordes. Como ya se ha dicho anteriormente, en el caso super-gaussiano, los gradientes transversales aumentan en los laterales del plasma y la densidad se mantiene constante (plana) en la zona central densa de éste ($1 \times 10^{20}cm^{-3} \leq n_e \leq 10^{21}cm^{-3}$). En el caso de $n = 1$ los gradientes transversales evolucionan poco, pero los isocontornos de densidad se curvan en la parte densa del plasma.

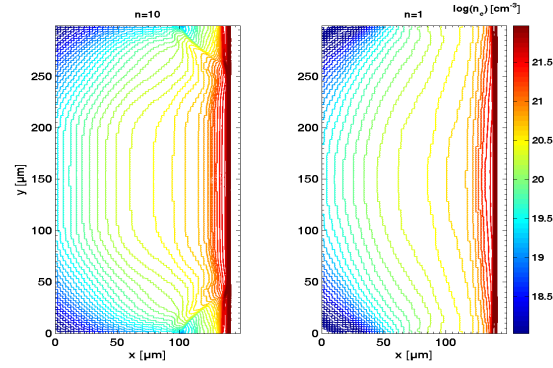
5.2. OPTIMIZACIÓN DEL PERFIL ESPACIAL DEL LÁSER



(a) $t = 0$ ps

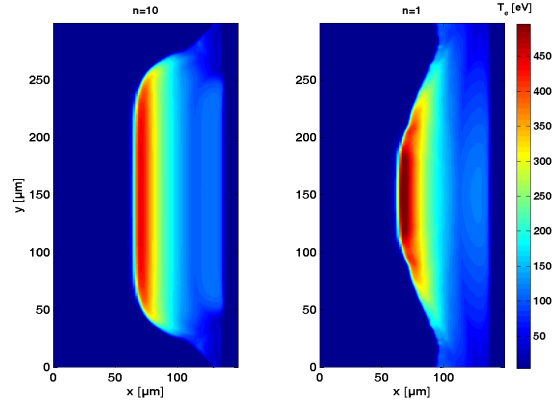


(b) $t = 200$ ps

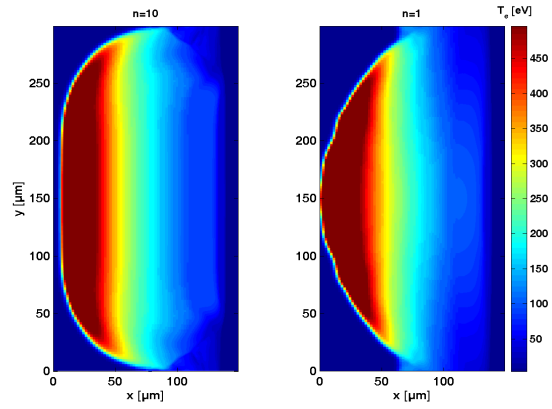


(c) $t = 400$ ps

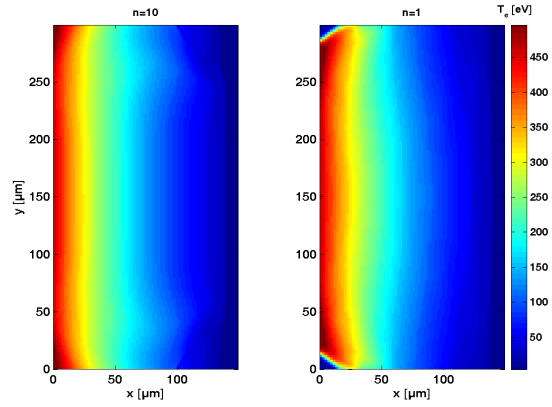
Figura 5.11: Mapas de densidad electrónica para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 300 \mu\text{m}$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$



(a) $t = 0$ ps



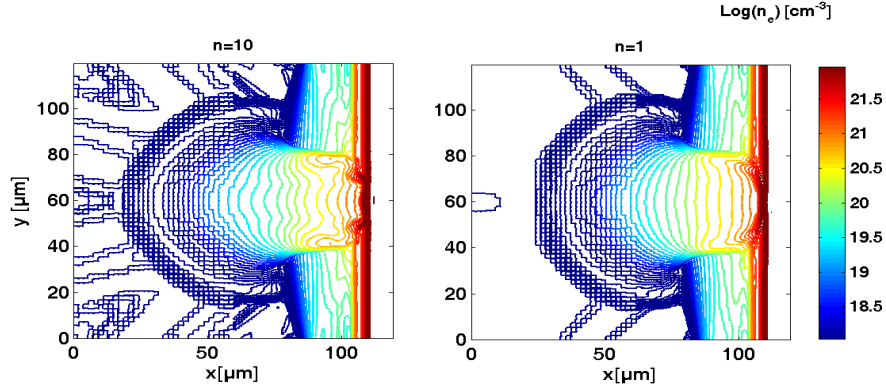
(b) $t = 200$ ps



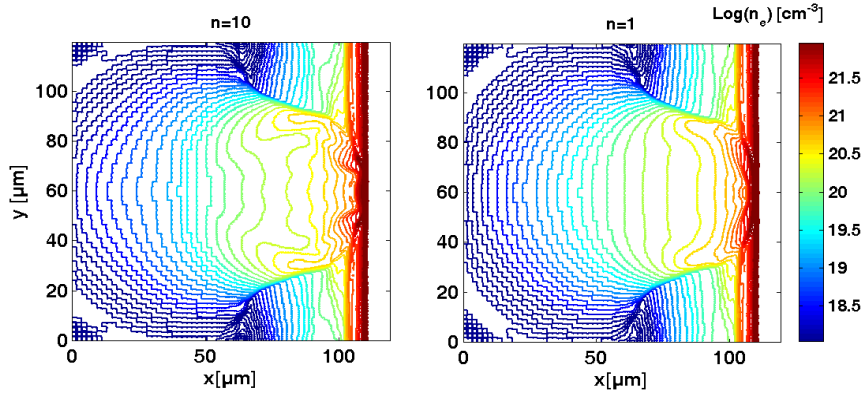
(c) $t = 400$ ps

Figura 5.12: Mapas de temperatura para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 300 \mu\text{m}$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$

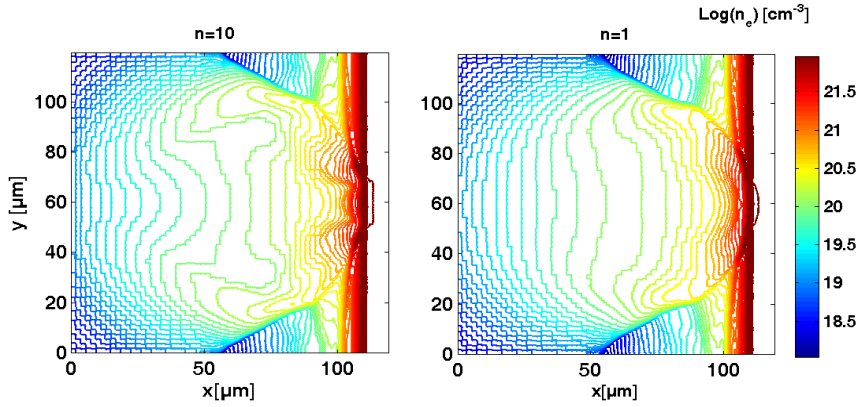
5.2. OPTIMIZACIÓN DEL PERFIL ESPACIAL DEL LÁSER



(a) $t = 0$ ps

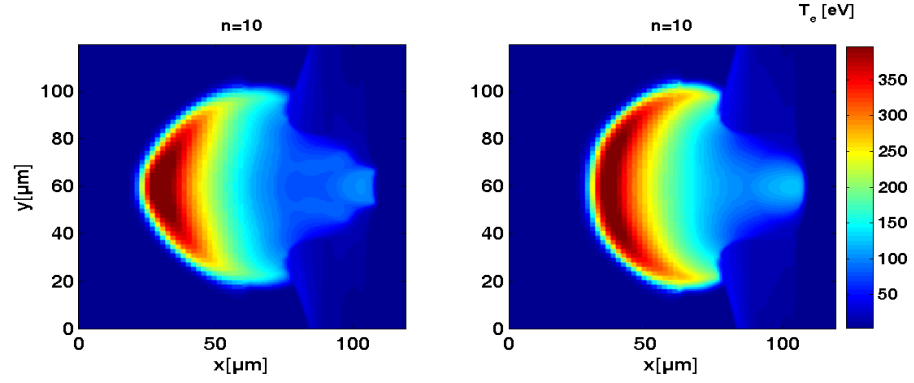


(b) $t = 200$ ps

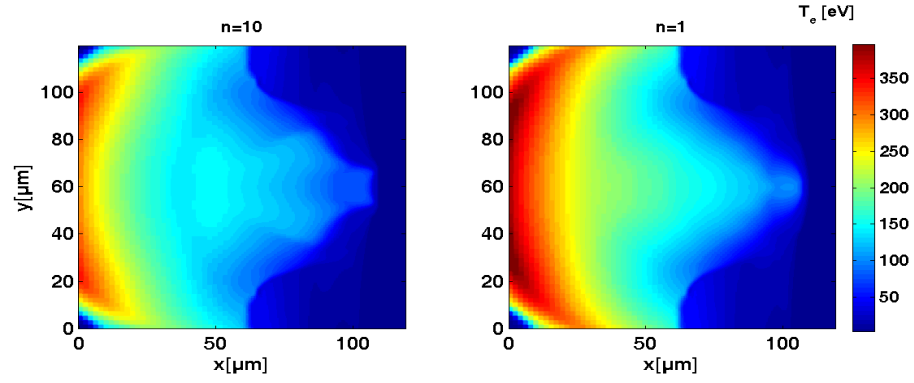


(c) $t = 400$ ps

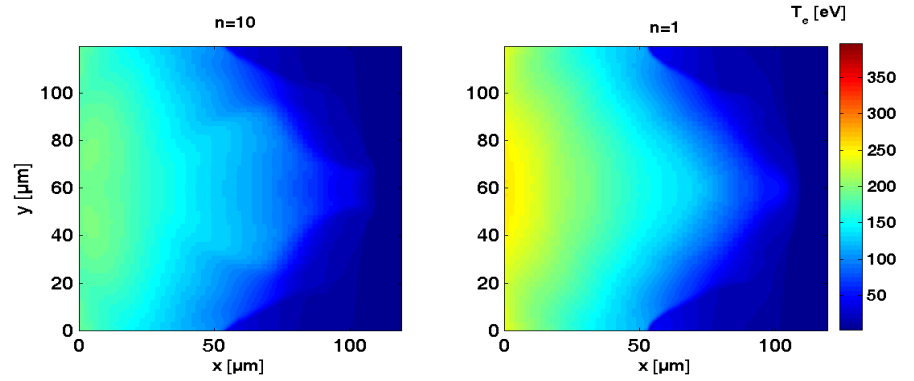
Figura 5.13: Mapas de densidad electrónica para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 15 \mu\text{m}$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$



(a) $t = 0$ ps



(b) $t = 200$ ps



(c) $t = 400$ ps

Figura 5.14: Mapas de densidad electrónica para varios instantes después de la llegada del máximo de la impulsión $h_x = 15 \mu\text{m}$. A la izquierda se ha usado $n = 10$ y a la derecha un láser gaussiano $n = 1$

La distribución de temperatura se representa en las figuras 5.12(a), 5.12(b), 5.12(c). En ellas se observa que el comportamiento para $h_x = 300\mu m$ es el mismo que el observado para $h_x = 100\mu m$. La superficie del plasma que presenta una temperatura e ionización homogénea es mayor en el caso super-gaussiano que en el gaussiano. Esta diferencia disminuye con el tiempo ya que, según el plasma se enfría, en el caso $n = 1$ la temperatura se homogeneiza en la parte densa del plasma.

Se puede concluir entonces que las diferencias observadas para $h_x = 100\mu m$ al usar perfiles gaussianos y super-gaussianos, siguen siendo válidas al aumentar el FWHM.

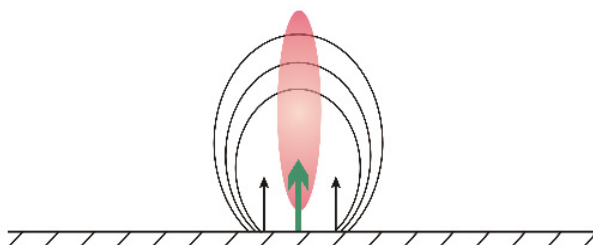
Al revés, también se puede estudiar la disminución del ancho de la línea focal (h_x). En este caso, se observa un comportamiento totalmente diferente del observado para $h_x > 100\mu m$. La estructura del plasma se vuelve completamente bidimensional, como muestran las figuras 5.13(a), 5.14(a). Justo después de la llegada del pico de la impulsión láser aparecen estructuras laterales (jets) en los casos gaussianos y super-gaussianos. La formación de este plasma se explica en los siguientes párrafos.

Desde los primeros momentos de la interacción, comienza la ablación del blanco generada directamente por la irradiación láser. Si se supone, para simplificar, que la energía se deposita sobre el blanco siguiendo un perfil super-gaussiano de orden elevado, se puede despreciar la contribución de las alas del perfil.

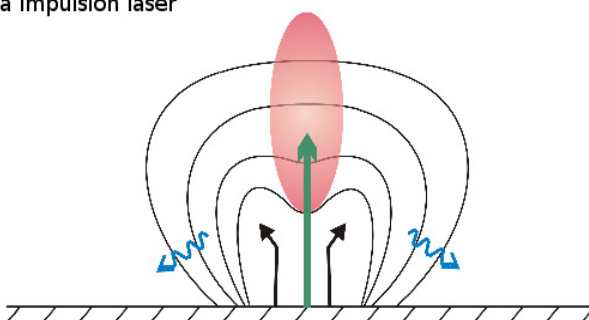
En el momento del máximo de la impulsión ($t = 0ps$), la temperatura es máxima en el centro del plasma, en el eje del láser. Esta región es más estrecha cuanto más cerca de un gaussiano está el perfil láser. La radiación X interacciona con los bordes del blanco no irradiados por el láser. Se forman plasmas medianamente densos ($n_e 0,1 - 10 \times 10^{21} cm^{-3}$) y fríos ($T_e 10 - 20eV$). La materia ablacionada en los bordes del foco del láser es inicialmente eyectada perpendicularmente al blanco. La presión térmica de la región caliente en el centro del plasma, impulsa la materia desde el centro hacia los bordes, calentando los laterales fríos. Se establece pues una estructura en doble lóbulo. El mecanismo en tres etapas se describe en la figura 5.15.

La estructura cóncava del frente de absorción formada por la cavidad de densidad presente en el eje del láser se ve reforzada por la presión radiativa y la conducción térmica de la corona. Los dos lóbulos laterales son calentados por la radiación X del plasma, y no por el láser, por lo que forman dos partes más frías de plasma que se alejan poco a poco del foco del láser. Los dos lóbulos son entonces recalentados por la conducción electrónica. Se observa que la superficie ablacionada aumenta con el tiempo. La estructura cóncava del plasma persiste y el proceso continua con una dimensión lateral que aumenta con la cantidad de materia ablacionada.

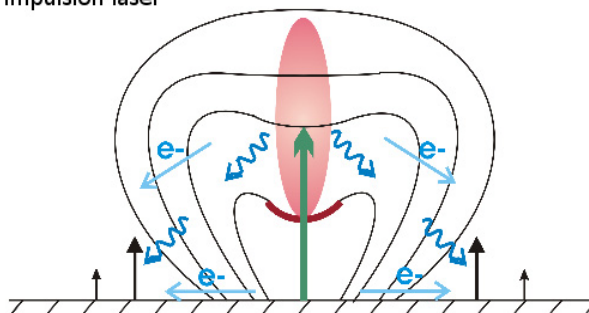
a) Principio de la impulsión láser



b) Pico de la impulsión láser



c) Fin de la impulsión láser







-  calentamiento por radiación X
-  ablación fuera de la línea focal
-  frente de absorción
-  conducción electrónica

Figura 5.15: Representación esquemática de los efectos implicados en la evolución del preplasma y fenómenos a los bordes

En el caso de una línea focal gaussiana, las condiciones iniciales de los

plasmas producidos en los bordes son diferentes. Éstos están más calientes. Aún así, estos plasmas siguen un proceso similar al descrito anteriormente, siendo la única diferencia que la modulación en densidad es más débil. De hecho, ésta aparece más tarde que en el caso hiper-gaussiano.

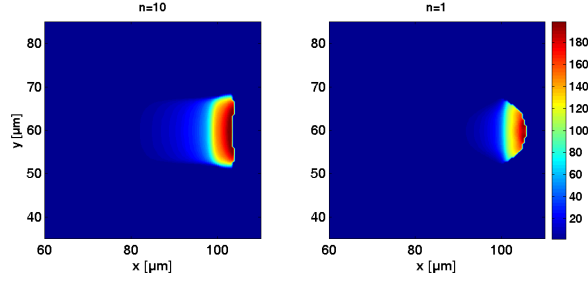
La descripción del plasma hecha aquí corresponde al caso en el cual la anchura de la línea focal es pequeña. De todos modos, también es aplicable a los casos de líneas focales más anchas, teniendo en cuenta que los efectos serán menos intensos en este caso.

5.2.5. Efecto del perfil espacial del láser sobre la distribución transversal de ganancia

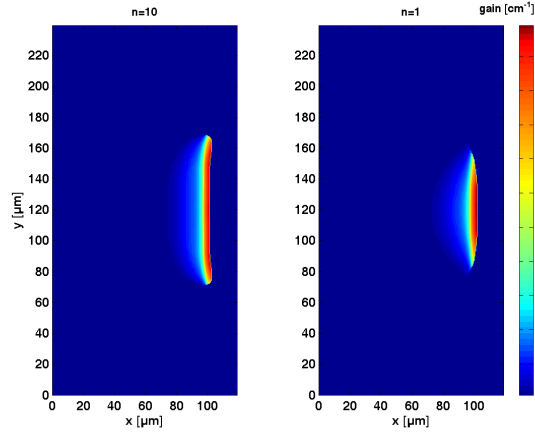
Hasta ahora, solo se ha estudiado la creación del plasma por la impulsión larga y su estructura hidrodinámica. Utilizando el modelo de tres niveles, expuesto en 4, se puede calcular la distribución espacial de ganancia a partir de los datos hidrodinámicos obtenidos en las simulaciones.

Se utiliza el mismo perfil espacial transversal para la impulsión corta y la larga. Se compararán pues dos casos donde todos los haces láser tendrán el mismo perfil, ya sea gaussiano $n = 1$ o super-gaussiano $n = 10$. La impulsión láser corta, que calentará el fluido electrónico, llegará con un retraso de $200ps$ entre picos de impulsión. La intensidad de la impulsión corta será de $8 \times 10^{13} Wcm^{-2}$. La ganancia se calcula en el momento de la llegada del pico de la impulsión corta. Las temperaturas electrónicas que se obtienen son del orden de 500 a 750 eV. La ionización sigue el perfil de temperaturas y, por tanto, el de la deposición láser. La zona caliente, donde se podrá dar la inversión de población, sigue igualmente el perfil espacial de deposición de energía de la impulsión corta, como se representa en la figura 5.16. Se obtiene pues una zona de ganancia más grande en la dirección transversal para el caso super-gaussiano que para el gaussiano.

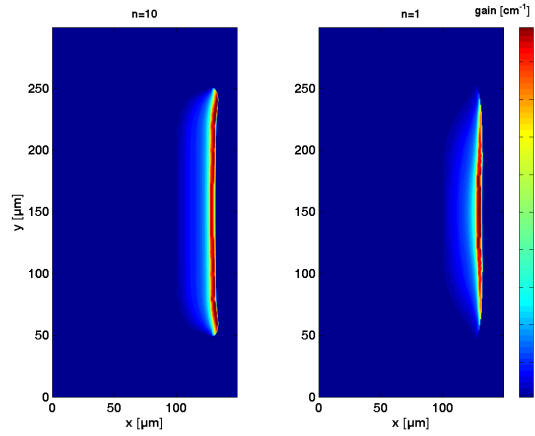
Es importante remarcar que el valor de la ganancia se sitúa en todos estos casos entre 160 y $180 cm^{-1}$. Para comparar más fácilmente los casos gaussiano y super-gaussiano, se ha realizado la diferencia entre ganancias, definida como $\delta g = g_{(n=10)} - g_{(n=1)}$ y representada en la figura 5.17. La diferencia δg se representa para cada ancho de línea focal h_x en las figuras 5.17(a)-5.17(c). La figura en la que se ha usado $h_x = 15\mu m$ se ha ampliado respecto a las restantes para facilitar su comparación. Se observa que la zona de ganancia está ligeramente más desplazada hacia el blanco en el caso de perfil gaussiano. Esto explica los valores negativos de δg cerca del blanco.



(a) Mapa de máximo de ganancia para $h_x = 15 \mu\text{m}$. La escala es diferente



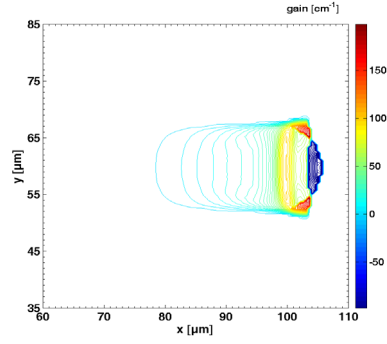
(b) mapa de máximo de ganancia para $h_x = 100 \mu\text{m}$



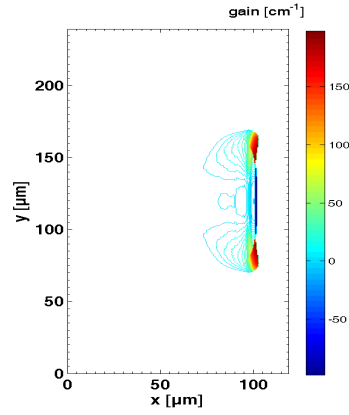
(c) mapa de máximo de ganancia para $h_x = 300 \mu\text{m}$

Figura 5.16: Mapa de ganancia para un retraso de 200 ps después del pico de la impulsión. A la izquierda el caso super-gaussiano $n = 10$ y a la derecha el caso gaussiano $n = 1$.

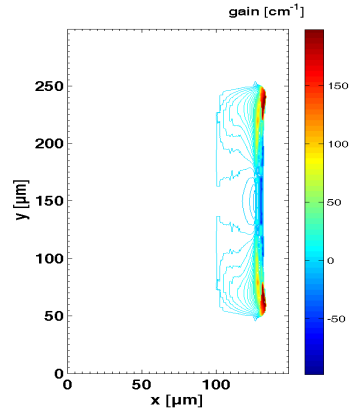
5.2. OPTIMIZACIÓN DEL PERFIL ESPACIAL DEL LÁSER



(a) mapa de la diferencia de ganancia máxima δg para $h_x = 15 \mu\text{m}$



(b) mapa de la diferencia de ganancia máxima δg para $h_x = 100 \mu\text{m}$



(c) mapa de la diferencia de ganancia máxima δg para $h_x = 300 \mu\text{m}$

Figura 5.17: Mapa de la diferencia de ganancia para un retraso de 200 ps después del pico de la impulsión

Sólo en el caso de $h_x = 15\mu m$ aparecen dos lóbulos laterales en la diferencia de ganancias desplazados en la dirección y . Esta diferencia alcanza en dichos lóbulos valores positivos que varían entre 10 y 50 cm^{-1} . Estos lóbulos aparecen debido a que el caso gaussiano presenta una superficie de absorción más curva.

La superficie útil de amplificación es pues mayor en el caso super-gaussiano para energías del láser idénticas a las usadas con perfiles gaussianos. De las simulaciones realizadas, se pueden obtener las siguientes relaciones:

$$a_x(n = 10) \approx 0,7 \times h_x \text{ (FWHM)} \quad (5.2)$$

$$a_x(n = 1) \approx 0,45 \times h_x \text{ (FWHM)} \quad (5.3)$$

Éstas son una estimación media según la dirección transversal. En el caso gaussiano, la anchura a_x aumenta de manera no lineal con h_x en comparación con el caso super-gaussiano. Se ha observado que si se cambia el retraso (0-400 ps) entre la impulsión larga y la corta, estas relaciones varían poco. La ionización media disminuye con el tiempo (pasa de $16 < Z^* < 18$ para un retardo $t = 0ps$ a $14 < Z^* < 16$ para un retardo $t = 400ps$) y el perfil de densidad transversal se modifica, cambiando el perfil transversal de ganancia. El valor medio de la ganancia disminuye también.

5.3. Conclusión

En este capítulo se ha expuesto el trabajo realizado por K. Cassou en su tesis doctoral [12, 14], antecedente de esta tesis. En él se ha estudiado el impacto del perfil espacial del láser (gaussiano o super-gaussiano) en la zona de ganancia. Se ha demostrado que las líneas focales super-gaussianas presentan ventajas interesantes. Éstas permiten crear pre-plasmas con menor refracción transversal del haz a inyectar y una zona de ionización y temperatura homogéneas mayor en la región densa del pre-plasma, donde se absorben las impulsiones láser. Los efectos de borde ligados al tamaño y perfil de la línea focal se han descrito. Se ha puesto en evidencia la importancia de los efectos bidimensionales en los plasmas utilizados para general láser de rayos X en esquema TCE y deben ser tenidas en cuenta a la hora de estudiar el esquema de inyección.

Se ha observado también que la longitud de la zona de ganancia según el eje y se mantiene bastante pequeña en todas las simulaciones presentadas hasta ahora. La deposición de energía se efectúa sobre una zona en la cual la extensión sobre el eje y es pequeña, entre $10 - 15\mu m$ dependiendo del retraso entre las impulsiones corta y larga.

Capítulo 6

Efectos 2D: Importancia del ancho del plasma

6.1. Introducción

En el capítulo 5 se han descrito las simulaciones realizadas para optimizar el perfil espacial del láser, concluyendo que los efectos bidimensionales tienen un impacto muy fuerte en la evolución del plasma. Comparado con el perfil clásico gaussiano, el perfil super-gaussiano aumenta la superficie donde existe ganancia y reduce la refracción del haz amplificado, ya que se favorece el acoplamiento del láser con el plasma y se reducen las pérdidas de energía debidas al enfriamiento lateral del plasma.

En este capítulo se describirán las simulaciones realizadas en el marco de esta tesis, prolongación natural de las explicadas en el capítulo anterior y se presentarán los resultados obtenidos, proponiendo un método para optimizar los plasmas amplificadores de radiación XUV.

6.2. Parámetros de las simulaciones

Una vez optimizado el perfil del láser, se han hecho simulaciones para estudiar la influencia del ancho focal en la hidrodinámica del plasma. En esta parte se han simulado amplificadores creados con el esquema de excitación colisional transitoria (*Transient Collisional excitation* TCE) [61]. Las simulaciones consisten en tres pulsos láser, cuyos máximos llegan al blanco en 1.5, 2 y 2.51 ns desde el principio de la simulación. Estos pulsos están representados en la figura 6.1. El ancho temporal de los pulsos (*Full Width at Half Medium* FWHM) son 1000, 100 y 0.5 ps respectivamente. Los intervalos temporales y la duración de los pulsos son resultantes de la optimización numérica [12] de

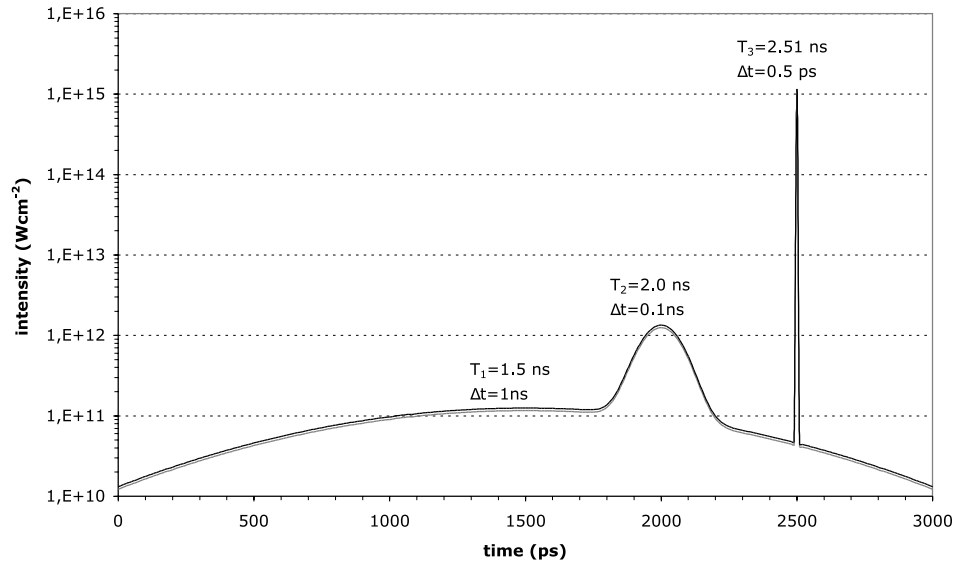


Figura 6.1: Esquema de los tres pulsos láser usados en estas simulaciones. El primer pulso simula el prepulso que crea el plasma. El segundo es el pulso principal que crea el estado de ionización adecuado, y el tercer pulso aumenta la temperatura de los electrones libres. El eje X representa el tiempo y el eje Y la intensidad en escala logarítmica.

cara a producir alta ganancia en el momento que se den las condiciones adecuadas para amplificación, como pueden ser gradientes de densidad suaves. El primer pulso crea un plasma débilmente ionizado que facilita la absorción de la energía del segundo pulso, que creará los iones neonoides en el plasma. El último pulso calienta instantáneamente los electrones libres, incrementando su energía cinética y, en consecuencia, las tasas de bombeo.

Todos los láser tienen un perfil espacial super-Gaussiano con $n = 10$ como se sugiere en [14]. El FWHM varía desde $20 \mu m$ a $1 mm$. Además, un caso extremo de $2 mm$ de ancho se ha estudiado. Este caso será presentado separadamente en la sección 6.5 por sus características especiales. Para poder comparar, las intensidades de los láseres son las mismas en todos los casos: $1,25 \times 10^{11} W/cm^2$ para el pulso de $1 ns$, $1,25 \times 10^{12} W/cm^2$ y $1,16 \times 10^{15} W/cm^2$ para los pulsos de $100 ps$ y $0.5 ps$ respectivamente. La longitud de onda del láser es $\lambda = 800 nm$. El blanco es una placa de hierro. Se ha elegido este material ya que las propiedades atómicas y ecuación de estado son conocidas con bastante exactitud. Los resultados de las simulaciones y del postproceso son mapas 2D en falso color (X-Y como se muestra en la figura 5.1) de los diferentes parametros de interés.

6.3. Resultados computaciones

Como se ha explicado en la sección 6.2, se han realizado simulaciones con diferentes anchos desde $20\text{ }\mu\text{m}$ a 1 mm . La variable a optimizar es la energía extraída del amplificador, por lo que los parámetros de interés son la ganancia y la fluencia de saturación.

En la figura 6.2 se representan los mapas de ganancia para los ocho casos simulados. Las figuras 6.2.A y 6.2.B se han ampliado en la figura 6.3 para una mejor apreciación de la zona de ganancia, ya que ésta es mucho más pequeña que la ventana de simulación.

Para el caso de $20\mu\text{m}$ de ancho (figura. 6.2.A) se obtiene una ganancia máxima de únicamente 13 cm^{-1} . Cuando se incrementa el FWHM del laser desde $20\text{ }\mu\text{m}$ a $30\text{ }\mu\text{m}$ (el ancho es multiplicado por un factor 1.5) la ganancia se incrementa sorprendentemente hasta un valor máximo de 60 cm^{-1} que es cuatro veces mayor que el anterior valor de 13 cm^{-1} . Para el plasma de $50\text{ }\mu\text{m}$ de ancho (ahora el ancho se ha multiplicado por un factor de 1.67) la ganancia solo es 1.33 veces mayor que en el anterior ($g_0 = 80\text{ cm}^{-1}$). El siguiente caso tiene un ancho de $75\text{ }\mu\text{m}$ y una ganancia máxima de $g_0 = 110\text{ cm}^{-1}$ (el ancho se multiplica por 1.5 y la ganancia por 1.375) y finalmente la ganancia alcanza su valor máximo de 126 cm^{-1} para un ancho de $100\text{ }\mu\text{m}$ (figura 6.2.E). Posteriores incrementos del ancho focal no aumentan el valor máximo de la ganancia.

En resumen, comparando desde la figura 6.2.A hasta la figura 6.2.H se observa una importante influencia del ancho focal en el valor máximo de la ganancia. Como se ha explicado, los casos *estrechos* (20 y $30\text{ }\mu\text{m}$) presentan una fuerte correlación no lineal entre el ancho y la ganancia. Por otro lado, en los plasmas anchos (100 , 150 , $200\text{ }\mu\text{m}$ y 1 mm) la ganancia máxima es independiente del ancho. Finalmente existen unos casos de *transición* (50 y $75\text{ }\mu\text{m}$) donde sigue habiendo cierta correlación entre el ancho y la ganancia pero ésta no es tan fuerte como en los casos más estrechos.

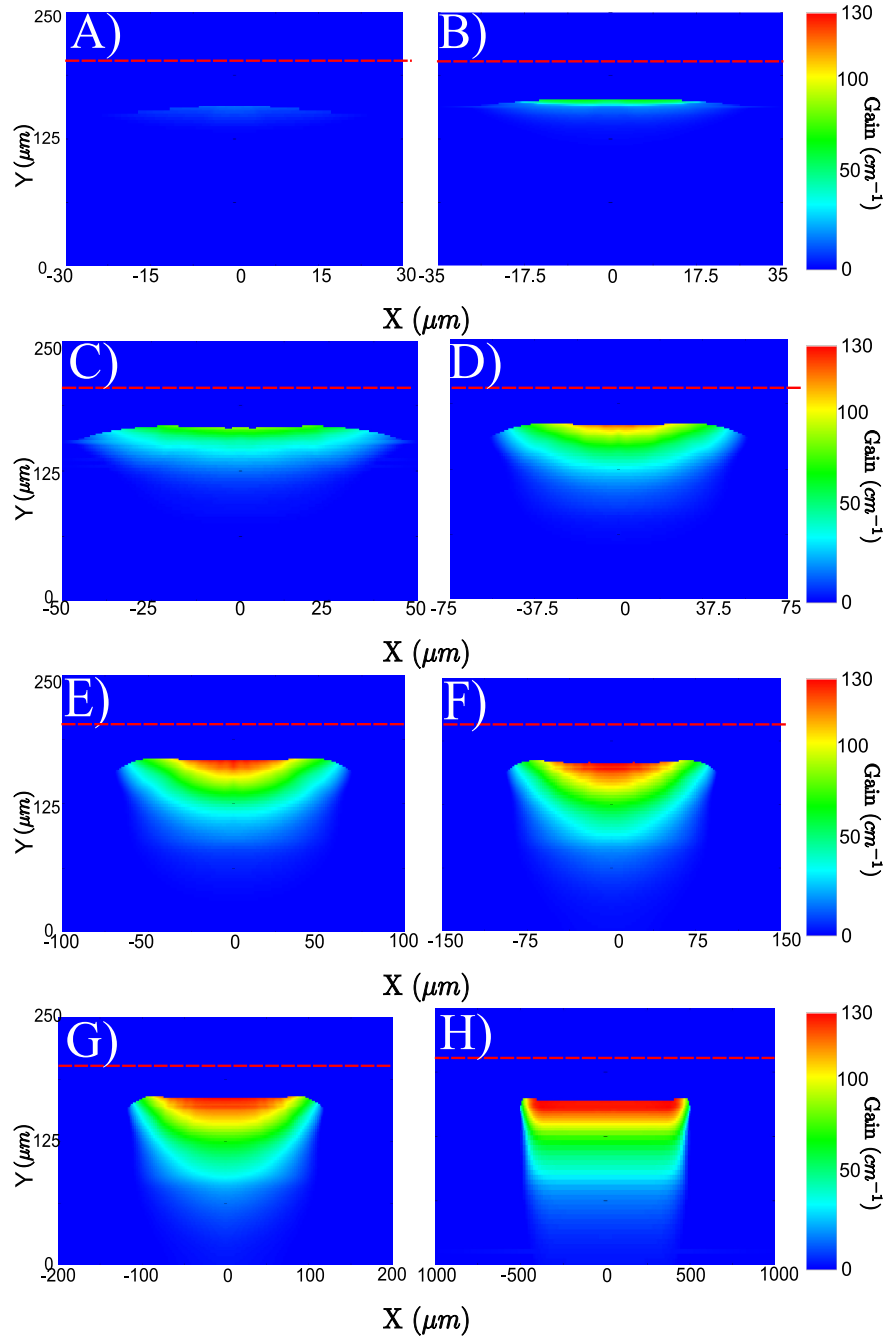


Figura 6.2: Mapas de ganancia para los casos simulados: 20 μm (A), 30 μm (B), 50 μm (C), 75 μm (D), 100 μm (E), 150 μm (F), 200 μm (G) y 1 mm (H). Todas las figuras tienen la misma escala vertical para permitir la comparación. La línea roja indica la posición del blanco. Los láseres inciden desde la parte inferior de las figuras

En la dirección Y también se observan diferencias sorprendentes: los casos más estrechos (20 y 30 μm) presentan una extensión vertical (dirección Y) de la zona de ganancia muy pequeña (16 y 11 μm respectivamente). Esta extensión se incrementa hasta alcanzar valores de 32,42 y 51 μm para los casos de 50, 75 y 100 μm respectivamente, mientras que los casos más anchos (150, 200 μm y 1 mm) presentan un valor similar de la extensión vertical (alrededor de 70 μm) en el centro del plasma ($X = 0 \mu m$). En la figura 6.3 se muestra la zona de ganancia de los casos de 20 y 30 μm ampliada. En ella se observa que la zona de ganancia tiene una extensión horizontal de unos 34 μm en ambos casos, que es 1.7 veces mayor que la anchura focal del láser en el caso de 20 μm , un hecho sorprendente si tenemos en cuenta que el perfil de los haces es supergaussiano, el cual debería reducir la expansión lateral, como se explica en [14]. En la figura 6.2 se observa el mismo efecto (zona de ganancia más ancha que el ancho del haz) para plasmas de 50, 75 y 100 μm de ancho. Para los casos de 150 y 200 μm (Fig. 6.2.F y 6.2.G) el ancho de la zona de ganancia es prácticamente el mismo que el del haz láser (1.13 y 1.1 veces mayor respectivamente), indicando que este efecto es menos pronunciado cuanto más ancho es el plasma. Finalmente, en la figura 6.2.H este efecto ha desaparecido completamente. La conclusión es que no solo la expansión en el eje Y juega un papel en la creación de ganancia sino también la expansión lateral a lo largo del eje X, ensanchando la zona de ganancia en los casos donde estos efectos bidimensionales son importantes (es decir, en los plasmas *estrechos*). Para plasmas más anchos, estos efectos no afectan a la mayor parte de la zona de ganancia, siendo su comportamiento aproximadamente unidimensional. Estos valores están resumidos en la tabla 6.1.

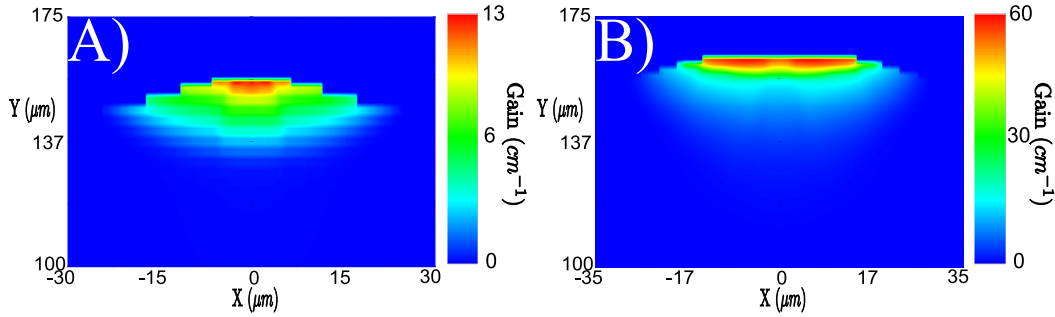


Figura 6.3: Mapas 2D de ganancia ampliados para los casos de 20 (izquierda) y 30 μm (derecha) que corresponden a las figuras 6.2.A y 6.2.B

De acuerdo con el comportamiento de la ganancia al variar el ancho del haz láser, se han identificado tres regímenes diferentes: el primero en los plasmas estrechos, con baja ganancia, extensión reducida en la dirección vertical

y zona de ganancia mucho más ancha que el ancho del láser (casos de 20 y 30 μm); el segundo en los plasmas más anchos, con alta ganancia, extensión vertical máxima y constante y con un ancho en la zona de ganancia que tiende a alcanzar el valor del ancho focal del láser (150, 200 μm y 1mm), siendo el tercer régimen el de anchos intermedios.

Estas diferencias en la extensión lateral y vertical de la zona de ganancia sugieren que los procesos hidrodinámicos juegan un papel fundamental. La creación de ganancia (que es un proceso atómico) está relacionada con la expansión del plasma (proceso hidrodinámico) a través de la ecuación 4.1. De hecho, la ganancia es proporcional a las poblaciones de los niveles entre los que se da la transición láser, que dependen del cuadrado de la densidad electrónica según la ecuación 4.3 (la densidad iónica varía linealmente con la densidad electrónica). Por tanto, un incremento de 1.43 en la densidad electrónica (que es el incremento observado entre los casos de 20 y 30 μm) daría lugar a una ganancia dos veces mayor. Sin embargo, la ganancia en el caso de 30 μm es cuatro veces mayor. La conclusión es que no solo los cambios en densidad electrónica son importantes sino que también la temperatura electrónica, a través de las tasas de colisión, tiene una influencia importante en la ganancia. La densidad y temperatura electrónicas son parámetros que se ven fuertemente afectados por la evolución hidrodinámica del plasma.

En la figura. 6.4 se muestran mapas 2D de la temperatura electrónica e isocontornos de densidad electrónica en el momento de mayor ganancia. En dicha figura se observa que, cuanto más estrecho es el plasma, menor es la densidad electrónica en la zona de ganancia, siendo de $0,67 \times 10^{20} cm^{-3}$ para el caso de 20 μm y de $0,9 \times 10^{20} cm^{-3}$ para el de 30 μm , lo que representa un aumento de 1.4 veces. La densidad electrónica continúa aumentando rápidamente con el ancho focal ($1,3, 1,92$ y $2,2 \times 10^{20} cm^{-3}$ para los casos de 50, 75 y 100 μm) mientras que los plasmas más anchos tienen valores similares de densidad electrónica (alrededor de $2,3 \times 10^{20} cm^{-3}$).

El mismo efecto aparece en la temperatura electrónica, empezando con un valor de 311 eV para el caso de 20 μm e incrementándose hasta 531, 491 y 524 eV para los casos de 30, 50 y 75 μm respectivamente. Finalmente la temperatura se estabiliza alrededor de 530 eV para los casos más anchos. Por todo esto, en los plasmas estrechos, la ganancia solo puede aparecer en una zona pequeña de densidad y temperatura relativamente elevadas ($N_e > 5 \cdot 10^{19} cm^{-3}$ y $T_e \approx 500 eV$). Para los plasmas más anchos, estas condiciones necesarias para la creación de la ganancia se dan en áreas mucho mayores (como se observa en las figuras 6.2 y 6.4).

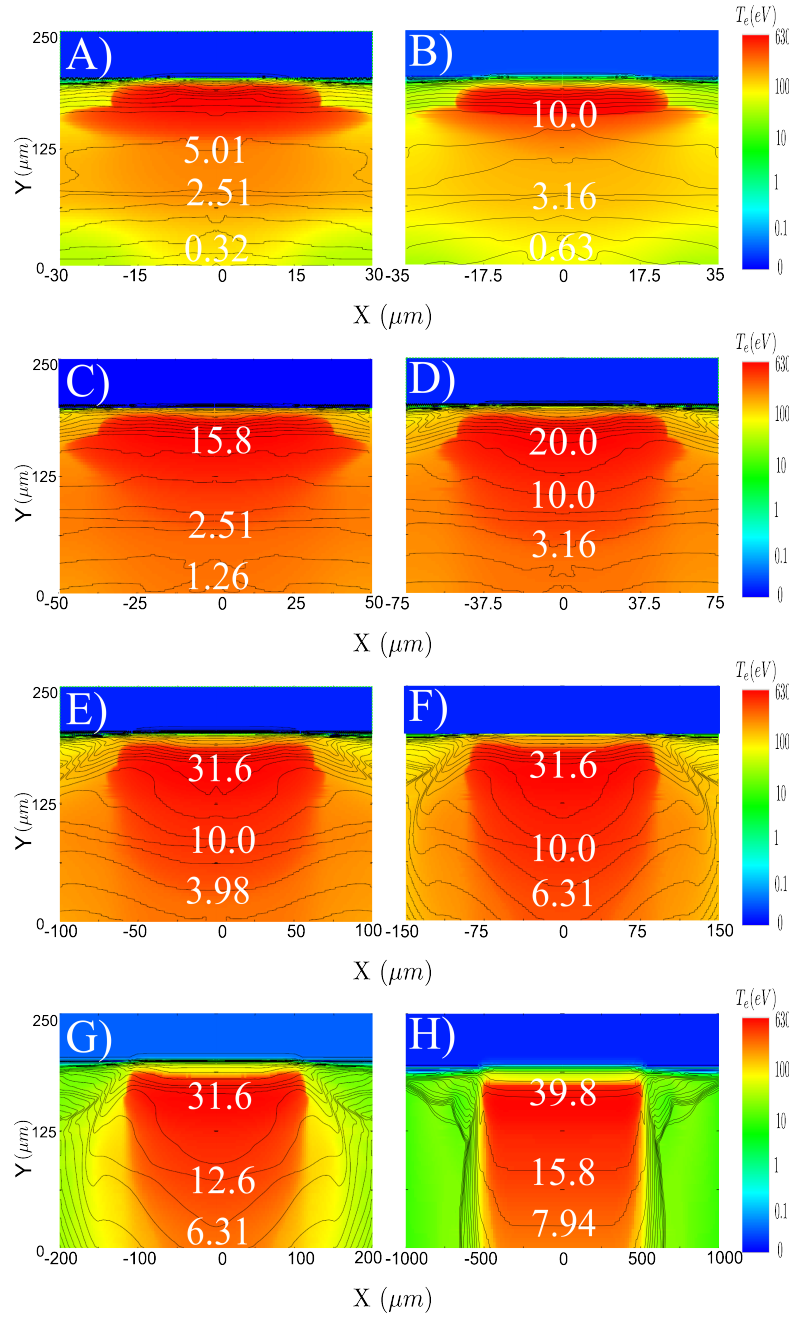


Figura 6.4: Mapas de temperatura electrónica en color e isocontornos de densidad electrónica para todos los casos simulados: 20 μm (A), 30 μm (B), 50 μm (C), 75 μm (D), 100 μm (E), 150 μm (F), 200 μm (G) y 1 mm (H). En blanco se muestran los valores de densidad electrónica ($\times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$). Los láseres inciden desde la parte inferior de la figura.

La figura 6.4 nos puede dar más información todavía. Desde la figura 6.4.A hasta la figura 6.4.D se observa que los isocontornos de densidad son aproximadamente paralelos al eje X. En la figura 6.4.E aparece cierta curvatura que se hace perfectamente visible en las figuras 6.4.F y 6.4.G, lo cual indica que existen gradientes laterales de densidad electrónica. Este efecto es máximo en el caso representado en la figura 6.4.H, donde estos gradientes laterales (en la dirección X) son claramente visibles. Estos gradientes confinan una zona de comportamiento unidimensional, que se expande únicamente en la dirección Y, y reducen la conducción térmica lateral. Esto explica el confinamiento de la ganancia en una zona con ancho igual al del láser en el caso de 1 mm.

Todas las diferencias observadas en la densidad y temperatura electrónica y comportamiento hidrodinámico son realmente sorprendentes, ya que la intensidad de los láseres es siempre la misma en todos los casos y, por tanto, sería de esperar un comportamiento auto-similar, que de hecho se observa en el centro de los plasmas más anchos. Las diferencias en la temperatura pueden explicarse teniendo en cuenta dos mecanismos: la conducción térmica y la absorción de la energía del láser. La conducción térmica depende de los gradientes de densidad electrónica. En la figura 6.4 se observa que no existen gradientes laterales en los casos de 20 y 30 μm (figuras 6.4.A y 6.4.B). Estos gradientes laterales comienzan a desarrollarse al aumentar el ancho, como se puede ver en las figuras 6.4.C, 6.4.D y 6.4.E y se observan claramente en las figuras restantes, especialmente en 6.4.H.

El segundo efecto es la absorción de la energía del láser a través del mecanismo de Bremsstrahlung Inverso. Como se observa en la fórmula 2.2, el coeficiente de absorción es proporcional a $n_e^{3/2}$. Los bajos valores de densidad electrónica en los casos más estrechos (20 y 30 μm) reducen considerablemente la deposición de la energía del láser en el plasma salvo en una pequeña región cerca de la densidad crítica, por lo que la temperatura electrónica será menor y por tanto la extensión vertical y los valores de la ganancia. Se puede concluir entonces que las diferencias observadas hasta ahora dependen, a través de diferentes mecanismos, de la densidad electrónica. Hay que tener en cuenta que la densidad electrónica no se ve afectada por el pulso corto, que únicamente incrementa la energía de los electrones libres. Por tanto, el abandono del régimen auto-similar en los casos más estrechos tiene que darse en las etapas tempranas de la evolución del plasma.

6.3. RESULTADOS COMPUTACIONES

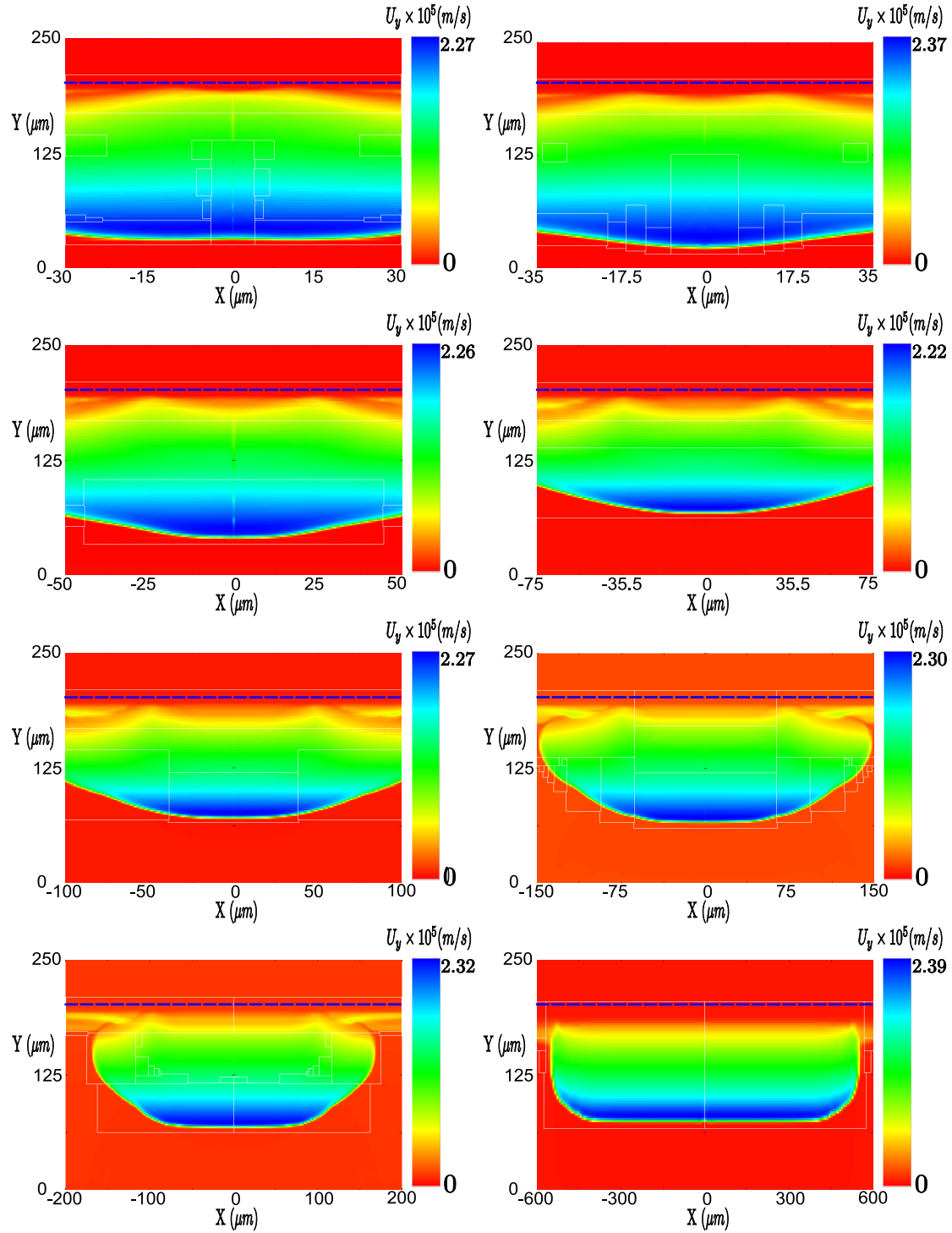


Figura 6.5: Velocidad vertical en $t = 1,5 \text{ ns}$ para los ocho casos. La línea azul indica la posición inicial del blanco. El plasma se expande hacia abajo.

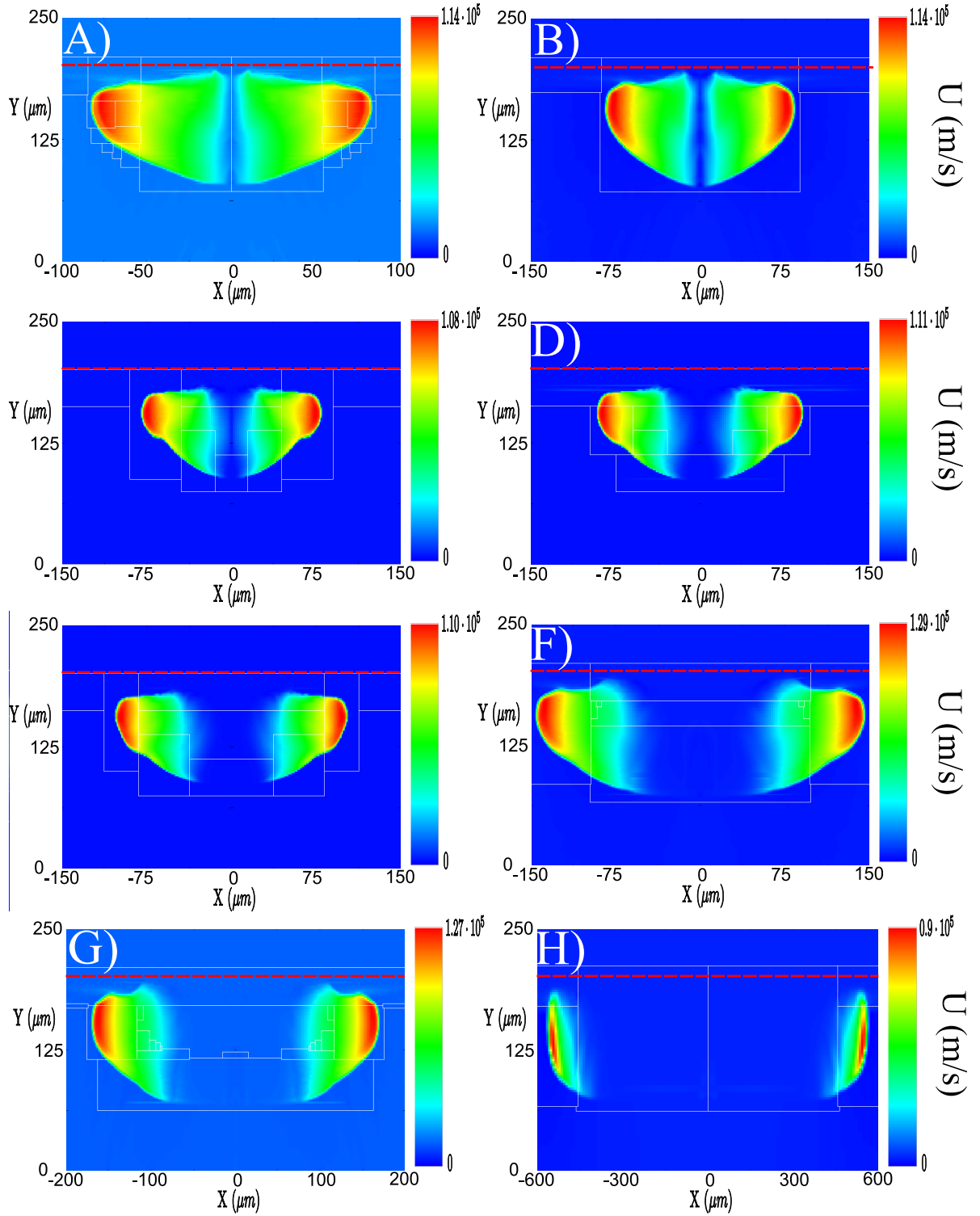


Figura 6.6: Velocidades del plasma en la direcci3n X para $t = 1,5$ ns para los ocho casos simulados. La escala horizontal es distinta en los casos de $20 \mu\text{m}$, $200 \mu\text{m}$ y 1 mm .

El plasma se expande principalmente en la dirección Y, siendo esta expansión la que usualmente determina los valores de los gradientes de densidad electrónica. En la figura 6.5, se presentan los mapas bidimensionales de velocidad vertical en $t = 1,5ns$. A primera vista, no se pueden apreciar los tres regímenes diferentes que habíamos identificado en la figura 6.2. Un estudio más detallado de estas velocidades nos da una velocidad vertical media de $\bar{v}_y \approx (2,30 \pm 0,08) \times 10^5$ m/s. Estos valores se alcanzan en la zona de baja densidad, mostrada en azul en la figura 6.5 que ocupa áreas similares en todos los casos.

Por ello, el abandono del comportamiento auto-similar tiene que estar relacionado con la expansión lateral del plasma, como el ancho de la región de ganancia en los plasmas pequeños (figura 6.3) y la curvatura de los isocontornos de densidad sugieren.

En la figura 6.6 se muestran las velocidades horizontales en $t = 1,5ns$ (que es el momento en el que el máximo del prepulso llega al blanco). En las figuras 6.6.A y 6.6.B se observa claramente que el fluido alrededor del centro del plasma está o ha empezado a expandirse lateralmente (la velocidad horizontal en las cercanías del centro es distinta de cero). Desde el momento en el que esta zona comienza a acelerarse lateralmente, esta expansión empieza a vaciar la zona central de materia hasta que la ganancia se produce ($\Delta t \approx 1ns$ en los casos estrechos). Esta disminución continua de densidad durante 1 ns explica los bajos valores de densidad electrónica y su homogeneidad horizontal que se puede observar en la figura 6.4. Los valores máximos en estos dos casos son $1,14 \times 10^5 m/s$ y $1,13 \times 10^5 m/s$ respectivamente.

Por otro lado, para los casos más anchos en $t = 1,5ns$ (figuras 6.6.F, 6.6.G y 6.6.H) el fluido en el centro del plasma sólo se expande verticalmente (la velocidad horizontal es nula). Las velocidades máximas encontradas son $1,29 \times 10^5 m/s$, $1,27 \times 10^5 m/s$ y $0,9 \times 10^5 m/s$ respectivamente. La región central tiene un comportamiento unidimensional. Esto es posible ya que la expansión horizontal puede aproximarse como una rarefacción adiabática (ver por ejemplo [99]). La extensión horizontal de la rarefacción viene determinada por la posición de la *cabeza* y la *cola*. La posición de estos puntos depende de las propiedades (velocidad horizontal y velocidad del sonido) de los dos estados entre los que la expansión tiene lugar. En nuestro caso, mientras el comportamiento auto-similar actúa, las velocidades horizontales de los dos estados entre los que se da la expansión son nulas (ya que estos estados son el centro del plasma, que se expande verticalmente, y el vacío circundante) y las velocidades del sonido son iguales para todos los casos en el mismo instante. Por ello, el tamaño de la zona expandida horizontalmente es el mismo para todos los casos. Por ejemplo, en $t = 1,5ns$ el tamaño es de unos $85 \mu m$ como se observa en la figura 6.6. La región expandida aumentará de tamaño hasta

que la cola de la rarefacción alcanza el centro del plasma, lo cual está ocurriendo en la figura 6.6.A y 6.6.B. Así pues, el parámetro de interés es la velocidad del sonido en el centro del plasma, ya que ésta definirá el tiempo en el que la rarefacción alcanza el centro del plasma o bien la cantidad de plasma que habrá sido acelerada horizontalmente cuando el pulso corto llegue. En estos casos, las máximas velocidades encontradas son $1,29 \times 10^5 m/s$, $1,27 \times 10^5 m/s$ y $0,9 \times 10^5 m/s$.

Estos casos son extremos: por un lado aquellos en los que la rarefacción ha alcanzado el centro del plasma en las etapas tempranas de su evolución (20 y 30 μm , figuras 6.6.A y 6.6.B) y los casos más anchos, donde existe una región en el centro del plasma que, en el momento de creación de la ganancia, se expande verticalmente únicamente (150, 200 μm y 1 mm, figuras 6.6.F, 6.6.G y 6.6.H). Los casos intermedios (figuras 6.6.C, 6.6.D y 6.6.E) presentan una zona central que no se ha visto afectada por la rarefacción en $t = 1,5 ns$. Sin embargo, esta zona es pequeña y se verá afectada por la expansión lateral antes de que la ganancia se produzca, explicando las diferencias observadas en la figura 6.2. Los valores máximos de velocidad encontrados en estos casos intermedios son $1,08 \times 10^5 m/s$, $1,11 \times 10^5 m/s$ y $1,10 \times 10^5 m/s$ respectivamente.

Ahora estamos en condiciones de explicar definitivamente los efectos observados en las figuras 6.2 y 6.4. El prepulso acelera el plasma en todos los casos. Éste empieza a expandirse lateralmente, independientemente del ancho del haz láser. En $t = 1,5 ns$ la expansión lateral alcanza el centro del plasma de 30 μm , como se muestra en la figura 6.6 (en el caso de 20 μm el centro del plasma empieza a expandirse antes y en plasmas más anchos después). Su comportamiento deja de ser similar al resto de casos, ya que la densidad en el centro se reduce por la expansión vertical y por la expansión horizontal. La conducción térmica se ve incrementada y transporta energía del centro al resto del plasma, reduciendo la temperatura. Cuando el láser de bombeo llega, la densidad electrónica tiene valores demasiado bajos, reduciendo la excitación colisional y la ganancia sólo puede aparecer en una región pequeña cerca del blanco. La energía del láser se absorbe de una manera eficiente en una pequeña región cerca de la densidad crítica, ya que el Bremsstrahlung Inverso depende fuertemente de la densidad electrónica, como se muestra en la ecuación 2.2. La combinación de estos efectos explica la pequeña extensión vertical de la zona de ganancia en los casos más estrechos. Estos mismos efectos aparecen en los casos de 50, 75 y 100 μm pero más tarde en el tiempo y por tanto las consecuencias son menos pronunciadas.

Los casos de 150 μm , 200 μm y 1 mm se comportan de manera similar en su región central, ya que la expansión horizontal no ha alcanzado dicha región cuando se crea la ganancia. Por ello, estos tres casos tienen el mis-

mo perfil de densidad electrónica (figura 6.4) y la ganancia tiene la misma extensión en la dirección Y (figuras 6.2.F 6.2.G y 6.2.H). Sin embargo, en $t = 2,54ns$, cuando se crea la ganancia, la región con $U_x \neq 0$ (velocidad horizontal distinta de cero) no es despreciable en los casos de 150 y 200 μm . La ganancia y los isocontornos de densidad presentan cierta curvatura. El caso de 1 mm es diferente. La región acelerada horizontalmente sigue siendo despreciable frente al ancho del plasma cuando se produce la inversión de población. Tenemos entonces una zona caliente y densa, con comportamiento unidimensional, confinada por los gradientes horizontales de densidad, donde se produce la ganancia. Todos estos datos hidrodinámicos se muestran en la tabla 6.1.

Cuadro 6.1: Parámetros en la zona de ganancia para los 8 casos estudiados.

Ancho (μm)	20	30	50	75	100	150	200	1000
Ganancia(cm^{-1})	13	60	80	110	124	126	126	126
Longitud X (μm)	34	36	76	100	120	170	220	1000
Longitud Y (μm)	16	11	32	42	51	70	80	76
$N_e (\times 10^{20} cm^{-3})$	0.63	0.9	1.3	1.91	2.2	2.2	2.37	2.37
T_e (eV)	311	531	491	524	531	531	529	536
$(\nabla N_e)_{x=0} (\times 10^{22} cm^{-4})$	0	1.87	1.83	1.56	2.42	1.76	1.97	2.07

6.4. Resultados computacionales: amplificación

Una vez estudiada la hidrodinámica del plasma, se van a considerar los procesos de inyección y amplificación de armónicos de alto orden en el plasma. El modelado de la amplificación del haz inyectado es una tarea compleja ya que el haz a amplificar sufre una fuerte refracción [21] además del conocido problema que surge ante los distintos anchos espectrales de los armónicos de alto orden y las transiciones en el plasma [110, 106, 107]. Este último punto (acoplamiento espectral) será tratado más tarde en este capítulo. En primer lugar se considera la propagación del haz en plasmas con distintos grados de homogeneidad, dependiendo del ancho del pulso (figura 6.2). Es interesante estimar, como paso previo a un cálculo más exacto de la propagación del haz, la energía disponible en el amplificador para ser extraída en un único paso de los armónicos de alto orden inyectados en el plasma. La ecuación 6.1 representa un límite superior de la energía que puede ser extraída; experimentalmente se obtendrá menos energía. Este parámetro (ver

por ejemplo [58, 90]) es útil para comparar la eficiencia de distintos plasmas amplificadores.

$$E_{avail} = (\ln G_0) E_{sat} = g_0 \cdot l \cdot E_{sat} \quad (6.1)$$

$$G_0 = \exp g_0 l \quad (6.2)$$

$$E_{sat} = F_{sat} \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (6.3)$$

En estas ecuaciones, la fluencia de saturación F_{sat} se obtiene resolviendo la ecuación 4.2 con nuestro modelo atómico y Δx y Δy son las extensiones espaciales de la región de ganancia en las direcciones horizontal y vertical respectivamente.

Como estimación de l en el cálculo de E_{avail} en la ecuación 6.1 se usará la distancia máxima que un haz inyectado puede recorrer hasta que sale de la zona de ganancia por efecto de la refracción. La deflexión lateral de un haz propagándose en un plasma una longitud l viene dado por la ecuación 6.4 (ver [77]). En su deducción se ha asumido un gradiente lineal de densidad electrónica, lo cual no está lejos de los resultados obtenidos en nuestras simulaciones, como se ve en la figura 6.7. La ecuación usada es:

$$\Delta Y(\mu m) \approx 2,24 \times 10^{-26} l^2 (cm) \lambda_{XUV}^2 (\text{\AA}) \nabla_y n_e (cm^{-4}) \quad (6.4)$$

donde λ_{XUV} es la longitud de onda del haz inyectado y $\nabla_y n_e$ el gradiente vertical de densidad electrónica. Usando como Δy la longitud de la zona de ganancia en la dirección Y y el gradiente de densidad electrónica es posible calcular la longitud máxima que el haz recorrerá dentro de la región de amplificación del plasma. Esta distancia corresponde a la longitud recorrida por el último rayo en escapar de la zona de ganancia (L_{max} en la figura 2.7. Los resultados para $\lambda_{XUV} = 25,5 nm$ se recogen en la tabla 6.2. En dicha tabla se observa una variación importante de la longitud de propagación al variar el ancho del plasma. En el plasma más estrecho ($20 \mu m$) la longitud de propagación es de 13 mm mientras que ésta cae hasta 6.3 mm en el plasma de $30 \mu m$. Esto se puede entender observando la figura 6.4, en la que se aprecian estructuras laterales que tienden a homogeneizar la región central del plasma. Este efecto disminuye en el caso de $30 \mu m$, siendo el gradiente de densidad mayor. Para focos más anchos, los gradientes de densidad se mantienen aproximadamente constantes, con valores entre 1.5 y $2,4 \times 10^{22} cm^{-4}$. Sin embargo, el aumento de la extensión de la zona de ganancia al aumentar el ancho focal permite una mayor propagación de la radiación a amplificar (desde 10.9 hasta 16.7 mm).

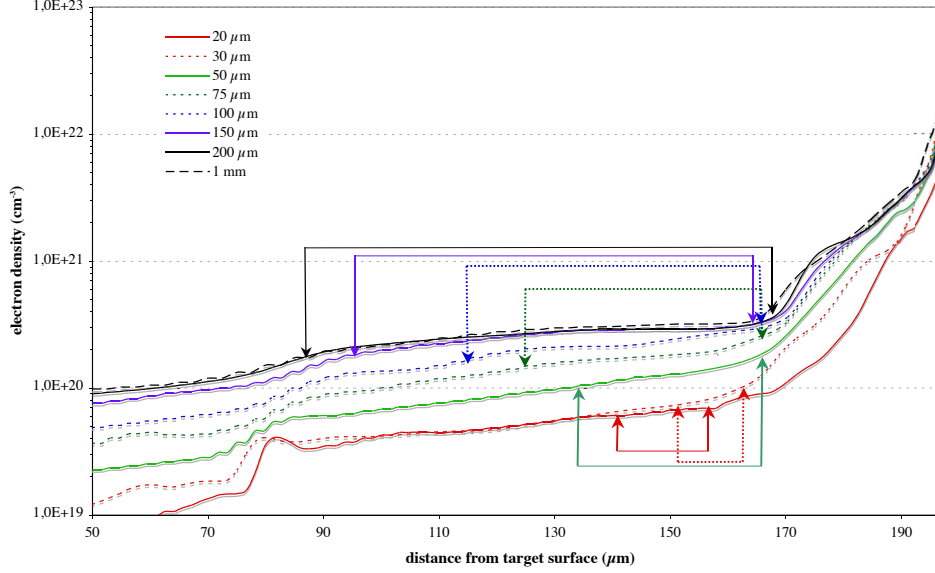


Figura 6.7: Cortes de densidad electrónica en la dirección Y en el centro del plasma ($X = 0 \mu m$) para los ocho casos estudiados. El plasma se expande de derecha a izquierda. La extensión de la zona de ganancia se indica con flechas.

Cálculos similares se han realizado con el gradiente lateral de densidad electrónica $\nabla_x N_e$. Sin embargo, la refracción en la dirección x es menos importante que en la dirección y y en la mayoría de los casos, tal y como se observan en la tabla 6.2. Los plasmas más estrechos ($20 \mu m$ y $30 \mu m$) son muy homogéneos en la dirección x debido a la fuerte expansión lateral que han sufrido y los plasmas más anchos ($200 \mu m$ y $1 mm$) presentan una meseta bastante grande de densidad constante en la dirección horizontal, siendo pues la refracción en la dirección x despreciable en todos estos casos. En el resto de los casos, la refracción en la dirección y es más restrictiva. Este resultado es lógico, ya que estamos usando focos super-gaussianos, lo cual disminuye los gradientes laterales de densidad electrónica como se explica en [14].

La energía de saturación se calcula multiplicando la fluencia de saturación (ecuación 4.2) que nos da nuestro modelo atómico, por el área de la región de ganancia. En el caso de $30 \mu m$, esta superficie es de aproximadamente 36

Cuadro 6.2: Gradientes de densidad electrónica y longitudes máximas de propagación hasta que la refracción desvía el haz de la zona de ganancia. El subíndice en la longitud indica la coordenada en la que se realiza la derivada de la densidad. Los casos de 20 y 30 μm no presentan ningún gradiente lateral y los de 200 μm y 1 mm tienen una meseta de densidad electrónica, siendo nulo el gradiente en ella.

Ancho (μm)	20	30	50	75	100	150	200	1000
$(\nabla_y N_e)_{x=0} (\times 10^{22} cm^{-4})$	0.65	1.87	1.83	1.56	2.42	1.76	1.97	2.07
$Longitud_y$ (mm)	13	6.3	10.9	13.6	12	16.5	16.7	15.8
$(\nabla_x N_e)_{y=cnt} (\times 10^{22} cm^{-4})$	—	—	0.86	1.93	1.72	1.4	—	—
$Longitud_x$ (mm)	—	—	14.1	11.5	14.1	19	—	—

$\mu m \times 8 \mu m$ a lo largo de las direcciones x e y respectivamente. La fluencia de saturación es de $F_{sat} = 2,28 J/cm^2$. Como la superficie de la zona de ganancia es de $2,9 \times 10^{-6} cm^2$, la energía de saturación estimada es igual a $E_{sat} \approx 6,6 nJ$. La máxima energía disponible en el plasma viene dada por la ecuación 6.1. Cualquier energía en el rango (E_{sat}, E_{avail}) puede obtenerse variando la longitud del plasma una vez que se ha alcanzado saturación. En la tabla 6.3, se resumen los valores de la fluencia y energía de saturación de todos los casos estudiados. Es interesante remarcar que la fluencia de saturación varía muy lentamente con la anchura focal del láser. De hecho, se observa únicamente un incremento del 20 % entre el caso de 20 μm ($2.2 mJ/cm^2$) y el de 1 mm ($2.61 mJ/cm^2$). Esto es lógico ya que la fluencia de saturación depende únicamente de la sección eficaz de emisión estimulada, σ , (ecuación 4.7) que solo depende de la temperatura iónica (ecuación 4.8) la cual no varía significativamente al usar diferentes anchos focales. Esto es así en nuestro modelo, ya que únicamente se tiene en cuenta el ensanchamiento Doppler, aunque sería conveniente tener en cuenta también el ensanchamiento colisional. El principal efecto del ensanchamiento colisional sería el de reducir ligeramente la ganancia. Así pues, se necesitarían plasmas más largos para alcanzar el mismo nivel de amplificación y, por tanto, láseres más energéticos. Sin embargo, los aumentos de anchura espectral inducen aumentos de la fluencia de saturación (ecuaciones 4.1 y 4.2) que dan lugar a mayores energías extraíbles. Por ello, estos dos efectos en primera aproximación se contrarrestan entre si, haciendo que nuestros cálculos sean válidos para comprender la dinámica de los plasmas amplificadores y estimar la energía que se puede extraer de dichos plasmas. Una nueva versión del modelo atómico en preparación tendrá en cuenta el ensanchamiento colisional, introduciendo cierta dependencia con la densidad electrónica [107].

La superficie de la región de ganancia se calcula a partir de la figura 6.2 y, a partir de dichos datos, se estima la energía de saturación como se ha explicado. Todos los valores calculados se muestran en la tabla 6.3. Se observa una fuerte correlación entre E_{sat} y el ancho focal, causada por el aumento del área de amplificación. En el plasma más estrecho ($20 \mu m$), la energía de saturación toma valores bajos de 1 nJ, aumentando rápidamente hasta 6.56 nJ en el caso de $30 \mu m$ y 64 nJ para $50 \mu m$ (es decir, ¡la energía aumenta 10 veces cuando el ancho se multiplica por menos de 2!) hasta $0.11 \mu J$ (110 nJ) para el caso de $75 \mu m$. Una vez que se alcanza el comportamiento 1D en la región central, la energía de saturación prácticamente varía linealmente con el ancho focal. Así, en el plasma de 1 mm se estiman energías de saturación de $2.24 \mu J$.

Una vez estimada la energía de saturación y la longitud máxima de propagación, se calcula la energía disponible (E_{avail}), que se muestra en la tabla 6.3. En estos valores se observa que al incrementar el ancho focal de $30 \mu m$ a $50 \mu m$ produce un aumento en la energía disponible desde $E_{avail} = 0,25 \mu J$ hasta $E_{avail} = 5,6 \mu J$, que es más de veinte veces el valor del caso de $30 \mu m$. El paso de $75 \mu m$ a $100 \mu m$ incrementa esta energía desde $E_{avail} = 16,5 \mu J$ hasta $E_{avail} = 22,3 \mu J$, que es un aumento proporcional a la variación del ancho focal (ambos se multiplican aproximadamente por 1.25). Un incremento inesperado se da en el caso de $150 \mu m$. El ancho se multiplica por 1.5 pero la energía disponible se multiplica por tres ($E_{avail} = 65,1 \mu J$). A partir de este ancho la energía disponible es proporcional al ancho focal: $E_{avail} = 97,4 \mu J$ para $200 \mu m$ (ancho y energía se multiplican por 1.33) y $E_{avail} = 447 \mu J$ para 1 mm (ambos se multiplican un factor 5). El caso de 1 mm representa un amplificador realmente interesante para alcanzar energías extraíbles por encima o cerca de $100 \mu J$, es decir, mayores que cualquier fuente de rayos x-blandos coherentes con duración menor de picosegundos disponible en la actualidad.

Los tres regímenes diferentes observados, en los cuales la energía se incrementa proporcionalmente con el ancho focal, están separados por súbitos incrementos de la energía disponible. El caso de $20 \mu m$ es muy particular ya que, a pesar del valor elevado de la longitud de amplificación, el producto $g_0 \cdot l = 16,9$ no alcanza el valor de saturación ($g_0 \cdot l \approx 18$, como se observa en [45]) debido al bajo valor de la ganancia. Se concluye que los plasmas más estrechos no son buenos amplificadores.

Cuadro 6.3: Energía de los pulsos largos y cortos, ganancia, fluencia de saturación, energía de saturación, energía extraída, energía disponible máxima a extraer y eficiencia de bombeo

Ancho (μm)	$E_{input,ns}$ (J)	$E_{input,ps}$ (J)	Ganancia (cm^{-1})	F_{sat} (mJ/cm^2)	E_{sat} (μJ)	E_{avail} (μJ)	E_{out} (μJ)	EF ($\mu J/J$)
20	0.75	1.75	13	2.22	1×10^{-3}	0.0169	0.01	4×10^{-3}
30	0.24	0.56	60	2.28	6.56×10^{-3}	0.248	0.06	80×10^{-3}
50	0.3	0.7	80	2.40	63.8×10^{-3}	5.6	0.6	0.610
75	0.33	0.77	110	2.50	0.110	16.5	1.1	0.980
100	0.39	0.91	124	2.50	0.150	22.3	1.5	1.130
150	0.57	1.33	126	2.56	0.313	65.1	3.1	1.590
200	0.78	1.82	126	2.63	0.463	97.4	4.6	1.770
1000	3.93	9.17	126	2.61	2.245	447	22	1.710

Como se ha explicado anteriormente, la energía disponible es un valor asintótico. Experimentalmente, aumentar la longitud del plasma una vez que se ha alcanzado la saturación es interesante para extraer la energía almacenada, pero se necesita más energía en los láseres de bombeo. Dependiendo de la energía de estos láser, se extraerá un valor concreto entre E_{sat} y E_{avail} . Esto se ha tenido en cuenta para testear nuestro modelo con experimentos recientes de inyección. En [110] la energía extraída observada fue 38 veces superior que la energía de saturación; en este trabajo, asumiremos un valor más conservativo haciendo que la energía extraída sea diez veces la de saturación, como se observó en [45].

Con estas asunciones, en el caso de $20\ \mu m$ se extraen unos 10 nJ, alcanzando 66 nJ en el caso de $30\ \mu m$, en muy buen acuerdo con la energía máxima observada en [106], que es de 50-60 nJ. Nuestro modelo (en el caso de ancho focal de $75\ \mu m$) también concuerda con los experimentos realizados por F. Lindau y colaboradores [55] y Cassou *et al* [13] pero sin inyección de armónicos. La comparación directa de energía y fluencia es válida de todas formas ya que ha sido demostrado por O. Guilbaud y colaboradores [96] que estos láseres emiten únicamente unos pocos trenes de pulsos.

De nuevo se observan tres regímenes: 20-30 μm de ancho focal con energías extraídas menores de 100 nJ; 50-100 μm con energías extraídas que aumentan rápidamente desde $0.6\ \mu J$ hasta $1.5\ \mu J$ y finalmente desde 150 μm hasta 1 mm, donde la energía aumenta linealmente con el ancho focal desde $3.1\ \mu J$ hasta $22.4\ \mu J$. La cantidad de energía que se puede extraer es comparable a la energía obtenida en el láser de electrones libres FLASH [7] que es en la actualidad la fuente más intensa de radiación X blanda coherente.

La eficiencia de bombeo se ha evaluado estimando la longitud de la columna de plasma necesaria para alcanzar un factor de amplificación de 1000 respecto a la energía del haz a inyectar. Este valor corresponde a una amplificación fuerte pero realista [106, 39]. Ya que el ancho espectral de los armónicos es unas 100 veces mayor que el ancho del láser de rayos x, la amplificación en el centro de la raya ha de ser de 10^5 . Para $20\ \mu m$, la longitud para alcanzar este valor es de 9 mm mientras que ésta cae hasta 2 mm para el caso de $30\ \mu m$, con un consecuente descenso de la energía de bombeo necesaria. Ésta se incrementa gradualmente con el ancho del plasma debido a que existe más materia que calentar. Así pues, la energía neta de bombeo es de 2.5 J para el plasma de $20\ \mu m$ y 1.9 J y 13.1 J para los plasmas de 150 μm y 1 mm. La eficiencia aumenta desde 4 nJ/J para el plasma más estrecho hasta 1590 nJ/J y 1710 nJ/J para los casos de 150 μm y 1 mm.

6.5. Resultados: Hacia plasmas más anchos

Se ha demostrado que aumentar el ancho del plasma (parámetro controlado con el ancho focal del láser) mejora considerablemente las propiedades de la zona de ganancia y la energía extraída del amplificador. Naturalmente, aparece una pregunta: Si tenemos suficiente energía, ¿cuán ancho podemos hacer el plasma? Como se ha explicado, la evolución del plasma será auto-similar al menos hasta que la expansión lateral llegue al centro del plasma. En las simulaciones descritas en este capítulo, se puede asegurar un comportamiento auto-similar durante todo el tiempo para plasmas a partir de $150 \mu m$ de ancho focal. En la figura 6.8 se muestra la región de ganancia para un plasma creado con un ancho focal de 2 mm, usando las mismas intensidades que en los casos precedentes.

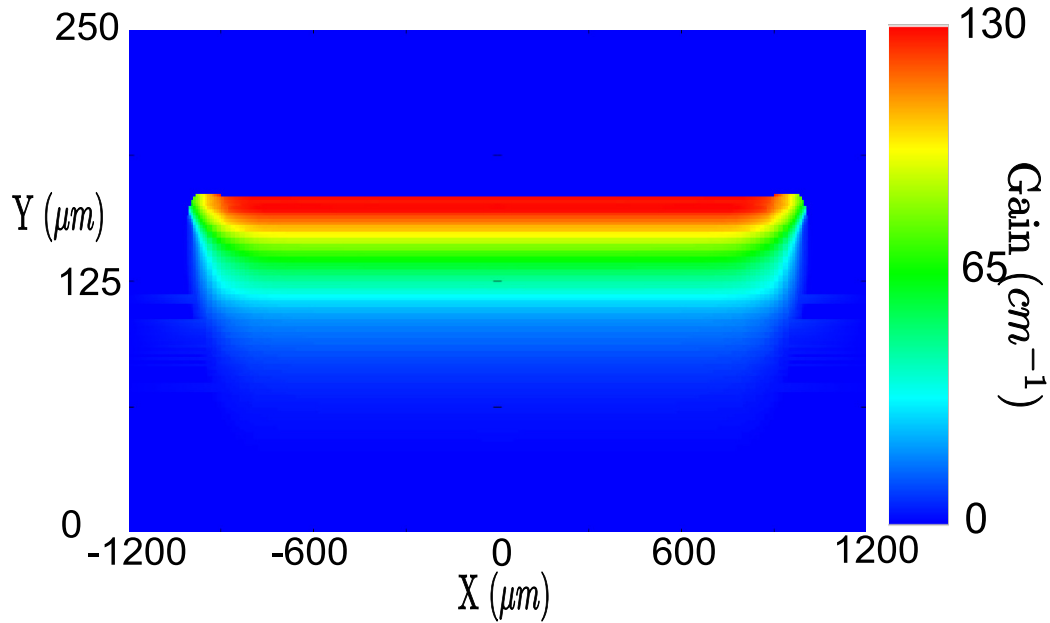


Figura 6.8: Ganancia de un plasma creado con un ancho focal de 2 mm. El láser incide desde la parte inferior de la imagen.

Como era de esperar, se observa una región homogénea 1D con un valor máximo de ganancia $g_0 = 130 cm^{-1}$. La energía de saturación es de $4.45 \mu J$ y la energía extraída, usando las mismas suposiciones que anteriormente, es de $44.5 \mu J$ (la energía disponible es de $E_{avail} = 821,47 \mu J$, lógicamente mayor que la que extraemos). El gradiente vertical de densidad $\nabla N_y = 2,85 \cdot 10^{22} cm^{-4}$ y la longitud máxima de propagación teniendo en cuenta la refracción es de 14.2 mm. La energía necesaria para crear y bom-

bear este plasma es $E = 25,78J$.

Sin embargo, existe una diferencia sustancial entre este caso y los presentados en la sección anterior. La longitud transversal (en la dirección x) de la zona de ganancia es de 2 mm, longitud comparable a la longitudinal de algunos plasmas amplificadores actuales. Además, los valores elevados de ganancia unidos a esta longitud dan lugar a un producto ganancia-longitud transversal de $g_0 \cdot l = 26$ (este valor es una estimación sin tener en cuenta efectos de saturación). Este producto está por encima de los valores comunes de saturación, que como se dijo anteriormente es aproximadamente $g_0 \cdot l \approx 18$ [45]. Así pues, si el plasma es lo suficientemente ancho, puede aparecer una emisión láser transversal, que reducirá la inversión de población y la energía que podemos extraer longitudinalmente. Por supuesto, existen diferentes efectos que pueden variar el ancho máximo hasta que aparezca la emisión láser transversal (no hay onda viajera transversal de bombeo, por ejemplo) pero se puede asegurar que la aparición de este fenómeno representa el límite superior del ancho del plasma, independientemente de la energía de bombeo de que dispongamos. En este estudio preliminar, consideraremos que no aparece emisión laser transversal si se mantiene la ASE a un nivel de una céntesima parte de la energía de saturación, es decir valores de $g_0 \cdot l$ entre 14 y 15.

Aún así, se pueden pensar en ciertos métodos para superar esta limitación. Si queremos mantener nuestro amplificador por debajo de la saturación transversal pero queremos aumentar su ancho, lógicamente hay que disminuir su ganancia para que el producto ganancia-longitud transversal se mantenga constante y por debajo de saturación. La ganancia es proporcional a la intensidad del pulso de bombeo (como se vio en los casos en los que los efectos hidrodinámicos no jugaban un papel fundamental en la parte central del plasma) por lo que si se reduce la intensidad del láser de bombeo, se reducirá la ganancia. En la figura 6.9 se presenta la región de ganancia de un plasma de 2 mm bombeado con un pulso láser con la mitad de intensidad que en los casos anteriores ($I = 5,8 \times 10^{14} W/cm^2$), siendo el prepulso y el pulso principal iguales. La ganancia máxima se reduce hasta $g_0 = 70 cm^{-1}$, obteniendo así un valor del producto ganancia-longitud transversal de $g_0 \cdot l = 14$. La intensidad del haz láser transversal que se emitirá para dicho producto es 55 veces menor que la intensidad de saturación y, por tanto, la energía que se perderá por este fenómeno será despreciable en comparación con la extraída longitudinalmente.

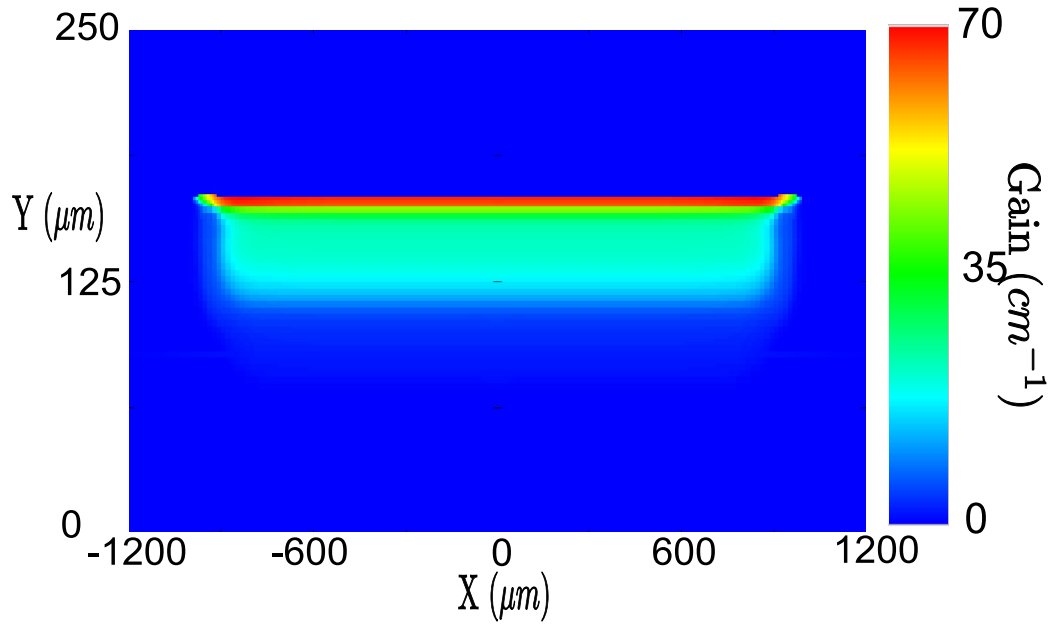


Figura 6.9: Mapa de ganancia para un plasma creado con un ancho láser de 2 mm, pero usando un pulso de bombeo con la mitad de intensidad que en los casos anteriores.

Aunque la fluencia de saturación es la misma en ambos casos (el prepulso y el pulso principal son iguales) la reducción de la superficie de ganancia disminuye la energía de saturación ($E_{sat} = 3,2\mu J$) y la energía extraída ($E_{out} = 32\mu J$). Además, la reducción de ganancia hace que sea necesario aumentar la longitud del amplificador hasta obtener saturación, aumentando desde 0.8 mm en el caso anterior hasta 1.6 mm. Esto no debería ser un problema ya que, aunque aumentamos la energía necesaria para crear y calentar el plasma ($E_{ns} = 13,18J$) necesitamos menos energía para bombearlo ya que hemos reducido la intensidad del pulso ($E_{ps} = 16J$) por lo que la energía total que necesitaremos no es muy diferente de la del caso anterior ($E = 29,18$), siendo la eficiencia de 1096 nJ/J, menor que en el caso de 1 mm pero muy por encima de la obtenida en plasmas estrechos. La longitud máxima de propagación hasta que el haz escape de la zona de ganancia por refracción es, en este caso, de 19.5 mm.

En conclusión, una posible solución del problema de la emisión láser transversal podría consistir en reducir la intensidad del láser de bombeo, a costa de aumentar la longitud del plasma y disminuir la eficiencia, aunque siempre dentro de valores aceptables. Las condiciones de la zona de ganancia siguen siendo muy convenientes para inyectar y amplificar armónicos.

6.6. Amplificación espectral

La amplificación del haz inyectado en el plasma viene descrita de manera simplificada por la ecuación 2.48, explicada en el capítulo 2. Restringiéndonos al centro de la línea, despreciando los términos fuentes y teniendo en cuenta los efectos de saturación en el coeficiente de ganancia (ver ecuación 2.59 en el mismo capítulo que la anterior), dicha ecuación se escribe así:

$$\frac{dI}{dx} = g_o I = \frac{g_0^{ss}}{1 + \frac{I}{I_{sat}}} I \quad (6.5)$$

Como en los capítulos anteriores se han realizado estimaciones de la energía extraída y no de la intensidad, es conveniente convertir la ecuación anterior en una ecuación para la energía:

$$\frac{dE}{dx} = g_o I = \frac{g_0^{ss}}{1 + \frac{E}{E_{sat}}} E \quad (6.6)$$

Ésta es una Ecuación Diferencial Ordinaria (E.D.O) que se puede resolver fácilmente y con mucha exactitud usando métodos numéricos estándar. En este caso se ha usado un método de Runge-Kutta-Fehlberg de orden 5. Existe la posibilidad de usar un paso adaptativo, que ajusta el tamaño del paso espacial según el error de la solución. Se puede encontrar una descripción exhaustiva de estos métodos en cualquier libro de cálculo numérico (por ejemplo [29]), por lo que aquí se dará simplemente una breve descripción.

Los métodos de Runge-Kutta construyen la solución avanzada y^{n+1} de la ecuación diferencial $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$ sumando un número determinado de términos a la solución en el paso actual $y^{n+1} = y^n + \sum a_i k_i$ donde $k_i = hf(x_n + \alpha_i h, y_n + \sum_j \beta_j k_j)$ y h es el paso temporal ($x^{n+1} - x^n = h$). La elección de los diferentes coeficientes a, b, α_i, β_i se realiza haciendo que la ecuación de la solución coincida lo mejor posible con el desarrollo en serie de Taylor correspondiente. Los parámetros para los diferentes esquemas se pueden encontrar tabulados en la bibliografía, por lo que aquí se exponen directamente los correspondientes al método de orden 5 con paso adaptativo.

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{4}, y_n + \frac{k_1}{4}\right) \\ k_3 &= hf\left(x_n + \frac{3h}{8}, y_n + \frac{3k_1}{32} + \frac{9k_2}{32}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 k_4 &= hf \left(x_n + \frac{12h}{13}, y_n + \frac{1932k_1}{2197} - \frac{7200k_2}{2197} + \frac{7296k_3}{2197} \right) \\
 k_5 &= hf \left(x_n + h, y_n + \frac{439k_1}{216} - 8k_2 + \frac{3680k_3}{513} - \frac{845k_4}{4104} \right) \\
 k_6 &= hf \left(x_n + \frac{h}{2}, y_n - \frac{8k_1}{27} + 2k_2 - \frac{3544k_3}{2565} + \frac{1859k_4}{4104} - \frac{11k_5}{40} \right) \\
 \tilde{y}_{n+1} &= y_n + \left(\frac{25k_1}{216} + \frac{1408k_3}{2565} + \frac{2197k_4}{4104} - \frac{k_5}{5} \right) \\
 y_{n+1} &= y_n + \left(\frac{16k_1}{135} + \frac{6656k_3}{12825} + \frac{28561k_4}{56430} - \frac{9k_5}{50} + \frac{2k_6}{55} \right) \\
 E &\approx \frac{k_1}{360} - \frac{128k_3}{4275} - \frac{2197k_4}{75240} + \frac{k_5}{50} + \frac{2k_6}{55}
 \end{aligned}$$

Como se puede ver, con este método se obtiene una estimación del error cometido. Esto nos permite ajustar el paso temporal h ya que si el error estimado es mayor que un límite máximo, se puede repetir la iteración reduciendo el paso temporal, aumentando así la exactitud del método y homogeneizando los errores en todos los puntos.

6.6.1. Casos estudiados

En esta parte se validará nuestro modelo de amplificación y las suposiciones realizadas en las secciones anteriores que nos han permitido estimar la energía extraída y eficiencia de los diferentes amplificadores. Una vez hecho esto, se procederá a aplicar nuestro modelo a diferentes esquemas de inyección [109].

Validación

En primer lugar, se ha realizado un caso base para corroborar las suposiciones hechas en los cálculos de energía extraída realizados anteriormente. La condición inicial utilizada para resolver la ecuación es la energía del haz de armónicos inyectado. Se ha considerado que el haz de armónicos tiene una energía de 1 nJ y que su anchura espectral es cien veces mayor que la anchura espectral de la línea láser, por lo que la energía efectiva que se ha usado como condición inicial es la centésima parte de la total del haz, es decir $E_0 = 10^{-2}nJ$.

Con los datos de ganancia y energía de saturación obtenidos de nuestras simulaciones, se han trazado las curvas de energía obtenida en función de la

longitud recorrida en el plasma para todos los casos estudiados en esta tesis. Los resultados se muestran en la figura 6.10.

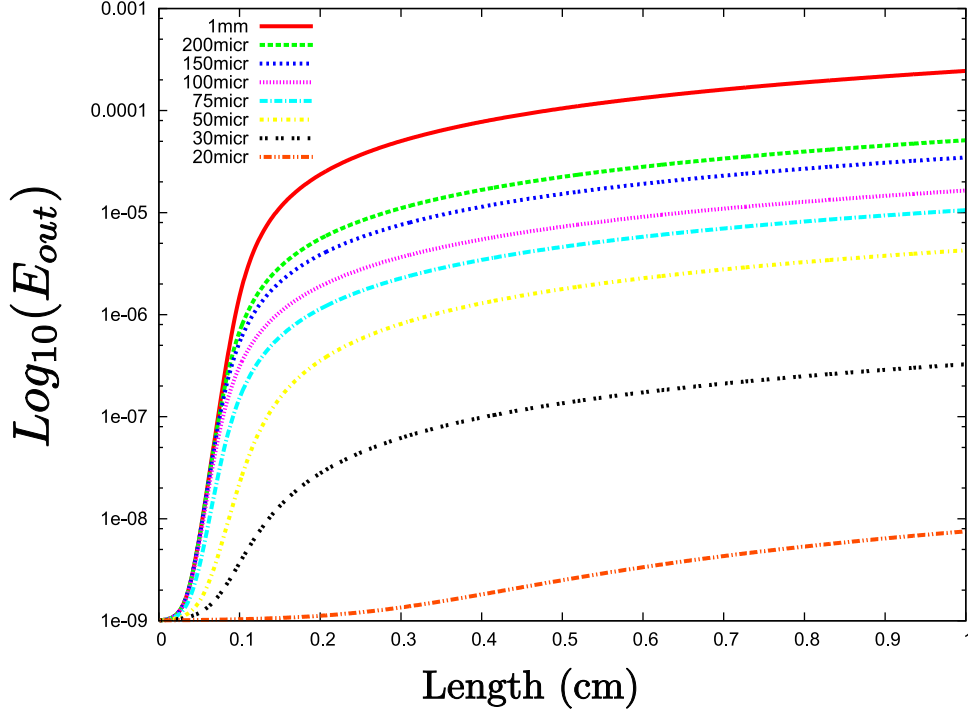


Figura 6.10: Energía del haz inyectado (en escala logarítmica) y longitud recorrida en el plasma para los distintos plasmas estudiados en esta tesis.

A pesar de la simplicidad del modelo, de la figura 6.10 se obtienen conclusiones muy significativas. En primer lugar se observa claramente que, salvo el caso de $20 \mu m$, se alcanza rápidamente el régimen de saturación (aproximadamente en 1 mm de plasma). Como se predijo, el caso de $20 \mu m$ necesita grandes longitudes de plasma para alcanzar la saturación y ésta no se observa en la figura 6.10 donde se ha simulado una columna de 1 cm de plasma.

De más importancia es el hecho de que, en el régimen de saturación, la energía varía linealmente con la longitud. Así pues, incrementar la longitud de la columna de plasma (por supuesto hasta el límite impuesto por la refracción, indicado en la tabla 6.2) permite aumentar la energía extraída (a costa de reducir la eficiencia ya que se necesita más energía en los láseres que crean y bombean el plasma). De hecho, en la figura 6.10 se observa que la suposición hecha en los capítulos anteriores de que la energía extraída es 10 veces la energía de saturación $E_{out} = 10E_{sat}$ es muy conservadora. Por ejemplo, en el caso de un plasma de 1 mm de ancho, la energía de saturación obtenida era de $E_{sat} = 2,245 \mu J$ (ver tabla 6.3). En la figura 6.10 se ve que esta

energía se alcanza al recorrer algo menos de 1 mm en el plasma. Esta energía de saturación se multiplica por un factor 10 al recorrer otro milímetro en el plasma (es decir, la energía extraída E_{out} usada en nuestros cálculos se podría obtener con un plasma de $1 \times 2mm^2$. Si seguimos aumentando la longitud obtendremos más energía en el haz amplificado a costa de tener que usar láseres más energéticos y reducir la eficiencia de nuestro sistema. Sin embargo esto no debería ser un problema ya que los láseres necesarios ya existen o bien están en proceso de construcción (como LASERIX, ILE o ELI) y la eficiencia es lo suficientemente elevada como para poder reducirla (ver tabla 6.3. Así pues, con un plasma de 1 mm de ancho y 10 mm de longitud (recordemos que la longitud máxima en este plasma sería de unos 15 mm, como se indica en la tabla 6.2) se podría llegar a extraer energías superiores a 0.2 mJ.

El siguiente caso estudiado ha sido el benchmark de los experimentos realizados en [106]. Como ya se ha explicado, el caso de $30 \mu m$ presenta un gran acuerdo en ganancia y densidad electrónica. Se ha simulado una inyección de armónicos débil $E = 0,7nJ$ y el acoplamiento espectral es malo, ya que se inyecta directamente el haz de armónicos de alto orden en el plasma. La ganancia y energía de saturación se han tomado de nuestra simulación 6.3. Así pues, sólo se considerará que se amplifica la centésima parte de la energía inyectada (el centro de la raya).

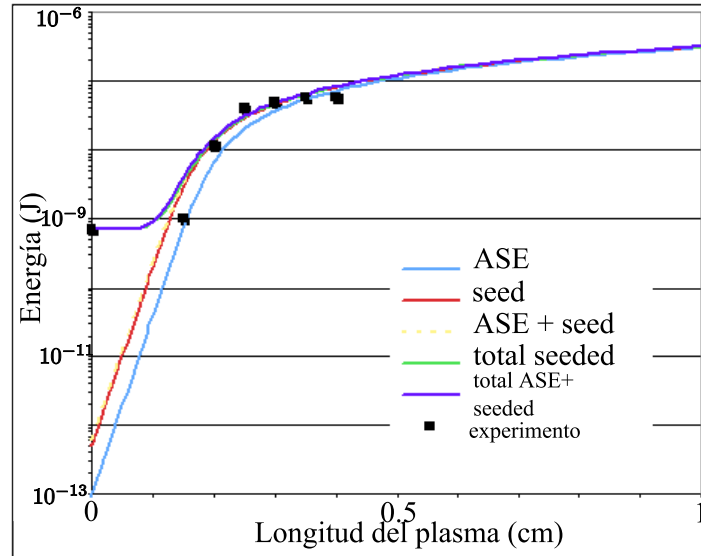


Figura 6.11: Energía del haz inyectado (en escala logarítmica) y longitud recorrida en el plasma en el caso de $30 \mu m$, comparado con [106].

En la figura 6.11 se muestran los resultados obtenidos. En ella se observa claramente la zona de estancamiento en el primer milímetro de plasma, seguida por la amplificación y la saturación al superar los 3 mm de plasma. Se observa que el acuerdo entre nuestro modelo y el experimento es muy bueno. Es cierto que la atenuación del haz al alcanzar saturación es superior en el experimento que en nuestro modelo. Esto podría deberse a la refracción del haz en el plasma, ya que nuestros cálculos predicen una longitud máxima de 6.3 mm (ver tabla 6.2) para que todo el haz escape de la zona de refracción. Es de esperar pues que para longitudes de 3 ó 4 mm, como es el caso experimental, parte del haz haya salido de la zona de ganancia, siendo menor la energía final. Finalmente, en la figura 6.11 se ve claramente que es imposible extraer más de $0.4 \mu J$ con estos plasmas.

Plasmas de 2 mm

Una vez validado nuestro modelo con el experimento reportado en [106], se va a aplicar este modelo al estudio de como sobrepasar la *frontera de los 100 μJ* . Para ello se usará el caso de 2 mm de ancho sin tener en cuenta la emisión estimulada transversal. Este fenómeno es completamente tridimensional y será necesario un programa como SHADOX para estudiarlo correctamente. Como se ha comentado, la ausencia de onda viajera de bombeo puede retrasar la aparición de la emisión transversal por lo que, en primera aproximación y para estudiar la importancia del acoplamiento transversal, se puede omitir este mecanismo del estudio.

En primer lugar se ha simulado una inyección débil aunque superior al caso anterior, de 100 nJ en el haz de armónicos. El problema del acoplamiento espectral sigue estando presente, ya que los armónicos se inyectan directamente en el plasma.

En la figura 6.12 se muestra la energía del haz, descompuesta en la contribución de la emisión espontánea, del haz de armónicos amplificado (centro de la línea) y los armónicos sin amplificar (longitudes de onda que no coinciden con la línea amplificada). Se observa que la amplificación del haz inyectado es inferior a la emisión espontánea. El haz amplificado alcanza una energía de $100 \mu J$ después de atravesar una distancia en el plasma relativamente elevada (3.2 mm) y alcanza una energía equivalente a la emisión espontánea amplificada al atravesar 5 mm. Además, la amplificación de la emisión espontánea se satura al alcanzar los 0.5 mm de plasma, mientras que el haz inyectado alcanza la saturación tres veces más tarde (1.5 mm) lo cual indica que se pierde una gran capacidad de amplificación en la emisión espontánea, teniendo menos energía disponible para amplificar el haz de armónicos.

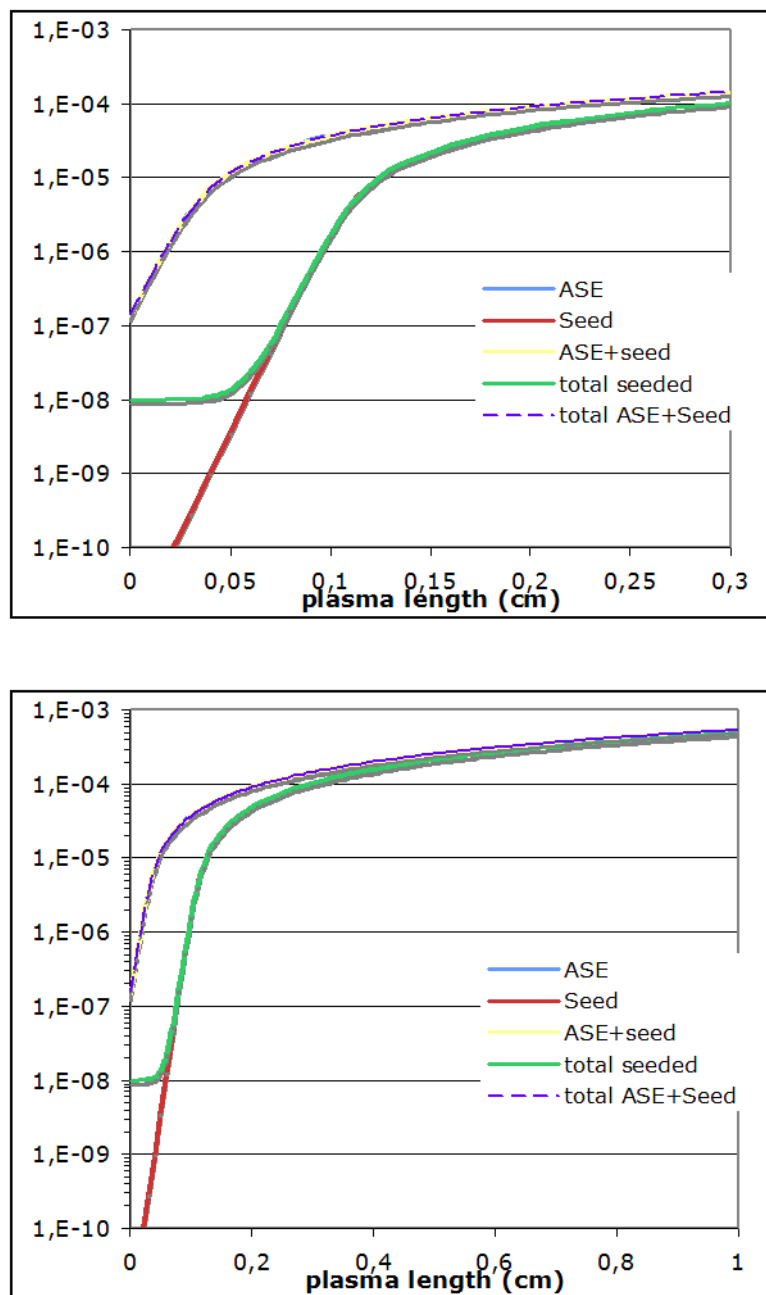


Figura 6.12: Energía obtenida en un plasma de 2 mm de ancho, inyectando 100 nJ de armónicos de alto orden directamente. La parte superior corresponde a los tres primeros milímetros de la inferior.

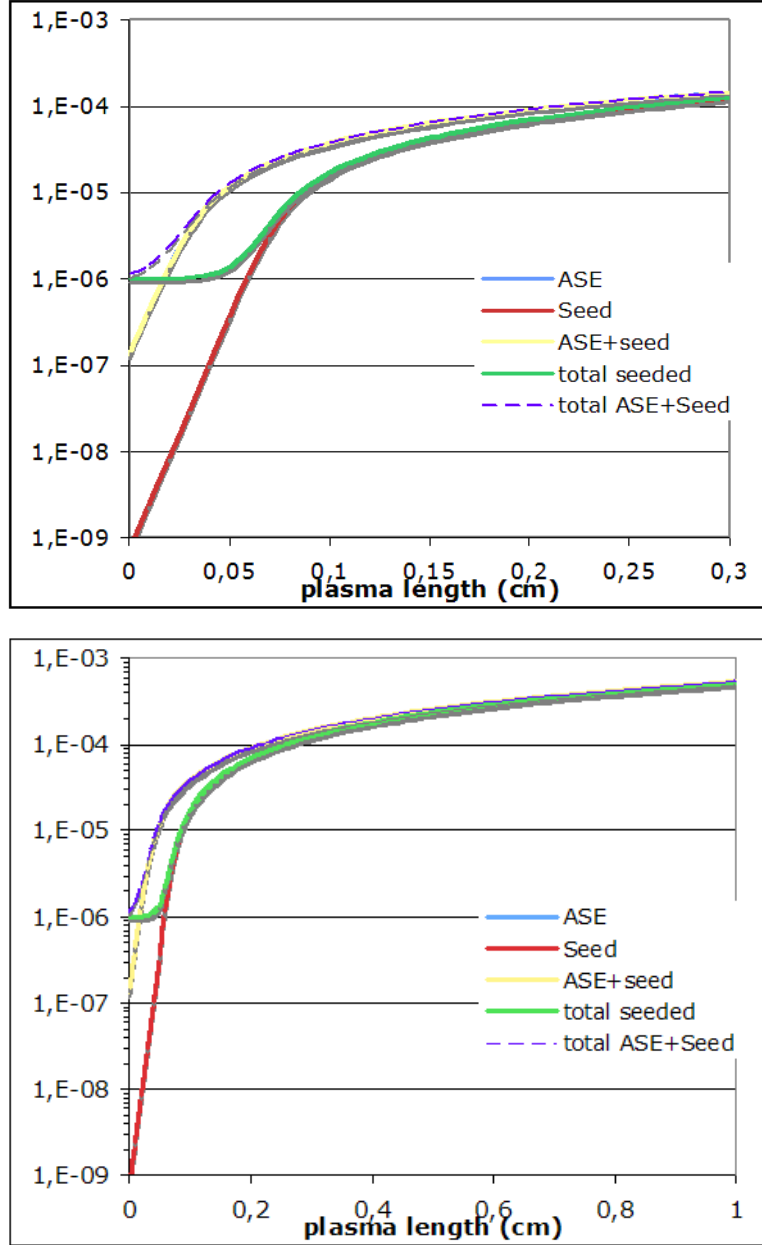


Figura 6.13: Energía obtenida en un plasma de 2 mm de ancho, inyectando 1 μJ de armónicos de alto orden directamente. La parte superior corresponde a los tres primeros milímetros de la inferior.

La primera solución obvia a este problema parecería ser inyectar más energía en el amplificador, de tal manera que el haz de armónicos sature antes que la amplificación de la emisión espontánea. Para estudiar esta solución se

CAPÍTULO 6. EFECTOS 2D: IMPORTANCIA DEL ANCHO DEL PLASMA

ha simulado una inyección fuerte ($1 \mu J$ de energía) directamente en el plasma amplificador, es decir, con un mal acoplamiento espectral.

De nuevo se observa que el haz inyectado sigue siendo inferior a la amplificación de la emisión espontánea. A pesar de que los armónicos alcanzan el régimen de saturación antes que en el caso anterior (1 mm de plasma) sigue siendo más tarde que la amplificación de la emisión espontánea, que alcanza saturación al atravesar 0.5 mm de plasma. Así pues, la inyección fuerte de armónicos en el plasma palía ligeramente el problema de la presaturación por la amplificación de la emisión espontánea pero no es suficiente.

En conclusión, parece claro que el problema del acoplamiento espectral es crucial en la amplificación de armónicos. Es pues necesario hacer que la energía del haz inyectado se concentre en el ancho de línea que es amplificado por el plasma. Para ello se puede utilizar un esquema de pre-amplificador, cuya función es simplemente reducir el ancho espectral del haz, y un amplificador encargado de aumentar la energía del haz. El esquema se representa en la figura 6.14.

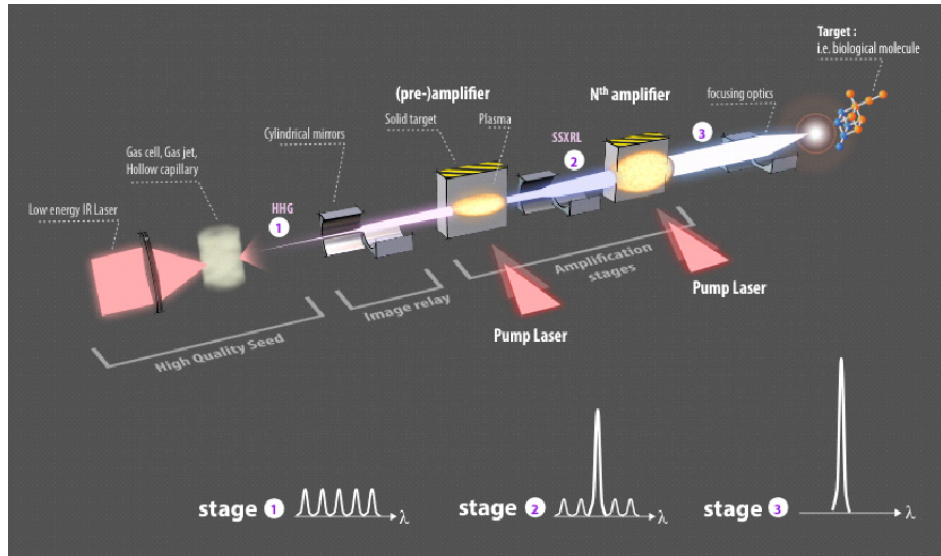


Figura 6.14: Esquema de amplificación de armónicos de alto orden multi-etapa. El haz de armónicos se inyecta en un pre-amplificador encargado de reducir el ancho de línea del haz a amplificar mientras que el amplificador se encarga de aumentar eficientemente su energía.

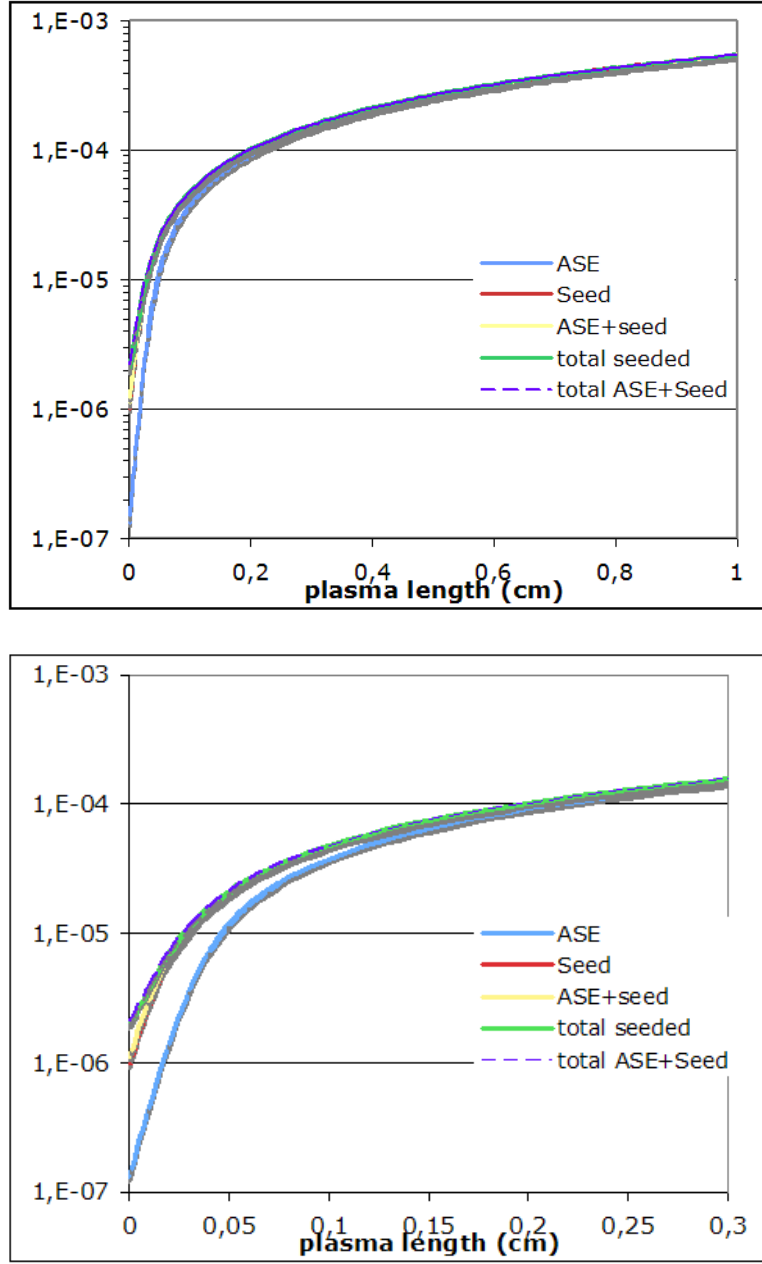


Figura 6.15: Energía obtenida en un plasma de 2 mm de ancho, inyectando 1 μJ de armónicos de alto orden directamente. La parte superior corresponde a los tres primeros milímetros de la inferior.

En este caso, inyectando fuertemente (1 μJ) y teniendo en cuenta que el ancho espectral del haz a amplificar coincidirá con el ancho espectral del amplificador, ya que ha atravesado previamente un pre-amplificador, se obtienen

los resultados expuestos en la figura 6.15

Las diferencias respecto al resto de casos son obvias. El efecto de pre-saturación por la amplificación de emisión espontánea desaparece completamente. De hecho, la energía contenida en dicho mecanismo es débil para longitudes menores que 1 mm y para mayores distancias es inferior a la del haz inyectado. Se alcanzan los 100 μJ en 2 mm y 200 μJ en 4 mm. A partir de este momento la saturación es fuerte y la amplificación es menos eficaz (aunque se pueden alcanzar 330 μJ en 6 mm).

Estos resultados son muy prometedores pero, debido a la simplicidad del modelo, es necesario realizar cálculos más complejos de inyección y amplificación. El código SHADOX permitirá estudiar con mayor precisión los efectos aquí expuestos (saturación, amplificación en régimen de saturación, refracción, etc ...) y la optimización de la inyección del haz, al poder variar diferentes parámetros como el ángulo y la focalización.

6.7. Conclusiones

En esta segunda mitad del capítulo se ha presentado un estudio numérico completo de distintos amplificadores TCE usando simulaciones hidrodinámicas 2D, continuando el trabajo previo presentado en [14, 68]. Se ha usado el código bidimensional hidrodinámico con transporte de radiación en AMR, ARWEN [64] y los datos obtenidos se han postprocesado con un modelo atómico de tres niveles, para estudiar la transición $2p_{\frac{5}{2}}3s_{\frac{1}{2}}J = 1 \rightarrow 2p_{\frac{5}{2}}3p_{\frac{1}{2}}J = 0$ de $\lambda = 25,5nm$ en hierro neonoide Fe^{16+} .

Nuestros resultados se han comparado con experimentos realizados por Wang *et al* [105, 106] obteniendo valores de ganancia, fluencia de saturación y densidad electrónica en la zona de ganancia en muy buen acuerdo con los valores experimentales. Nuestro modelo sugiere que la zona de ganancia en dichos experimentos es muy pequeña a causa de efectos hidrodinámicos, limitando intrínsecamente la energía que se puede extraer hasta valores por debajo de 100 nJ. Las simulaciones realizadas de plasmas más anchos corroboran esta asunción. La expansión lateral en las etapas tempranas de la evolución del plasma pueden tratarse como rarefacciones entre dos estados (el centro del plasma y el vacío o gas a muy baja presión de la cámara). Por ello, todos los plasmas han de presentar un comportamiento auto-similar. Esto es válido hasta el momento en el que la rarefacción alcanza el centro del plasma, lo cual ocurre antes en los plasmas más estrechos (este momento depende de la velocidad del sonido en el centro del plasma, que será la misma para todos los casos mientras dure el comportamiento auto-similar). A partir de ese momento, la densidad electrónica en el centro se reduce no solo por

la expansión vertical, sino también por la lateral, inhibiendo el mecanismo creador de la inversión de población (excitación colisional con electrones) y disminuyendo, por tanto, la ganancia de pequeña señal y la extensión de la región de ganancia. En los plasmas más anchos, la expansión lateral no alcanza la región central antes de que se produzca la ganancia. Por ello, se ha propuesto una nueva geometría, incrementando el ancho y reduciendo la longitud del plasma para extraer más energía e incrementar dramáticamente la eficiencia de bombeo. Con esta nueva geometría, energías tan altas como $22 \mu J$ podrían obtenerse con plasmas de 1 mm de ancho.

La emisión láser transversal aparecerá cuando el producto ganancia-ancho se aproxime a los valores de saturación, siendo éste el límite (y no la energía disponible en los láseres de bombeo) de las anchuras que se pueden usar. Sin embargo, si se reduce la intensidad del láser de bombeo, se reducirá la ganancia y, por tanto, la emisión láser transversal, a la vez que el amplificador sigue conservando las propiedades óptimas para amplificar radiación.

Una vez optimizado el plasma amplificador se ha modelizado de manera simple la amplificación espectral de un haz de armónicos. Con este modelo se ha mostrado que, aunque los armónicos inyectados tengan bastante energía ($1 \mu m$), la amplificación de la emisión estimulada domina el proceso de amplificación, reduciendo la energía disponible para amplificar el haz de armónicos. Esto es debido a que las grandes diferencias en el ancho de banda del haz de armónicos inyectado directamente en el plasma y de la línea a amplificar hacen que la mayoría de la energía del haz no sufra ningún proceso de amplificación. Este obstáculo se puede superar mediante un esquema en el que un pre-amplificador se encargue de reducir el ancho espectral de los armónicos, inyectando este haz en un amplificador que aumentará la energía del haz.

Con este nuevo esquema, energías de más de $100 \mu J$ podrían obtenerse, ya que en pocos años se dispondrá de láseres con la suficiente energía, lo cual será un gran paso hacia delante en el campo de los láseres de radiación x blanda inyectados. Asumiendo una duración de los pulsos de 100 fs, como se explica en [107] y una focalización limitada por la difracción de $0.1 \mu m$, intensidades tan grandes como $10^{19} W/cm^2$ podrían obtenerse con estos láseres.

Capítulo 7

Estudio del impacto de modulaciones de pequeña escala

7.1. Introducción

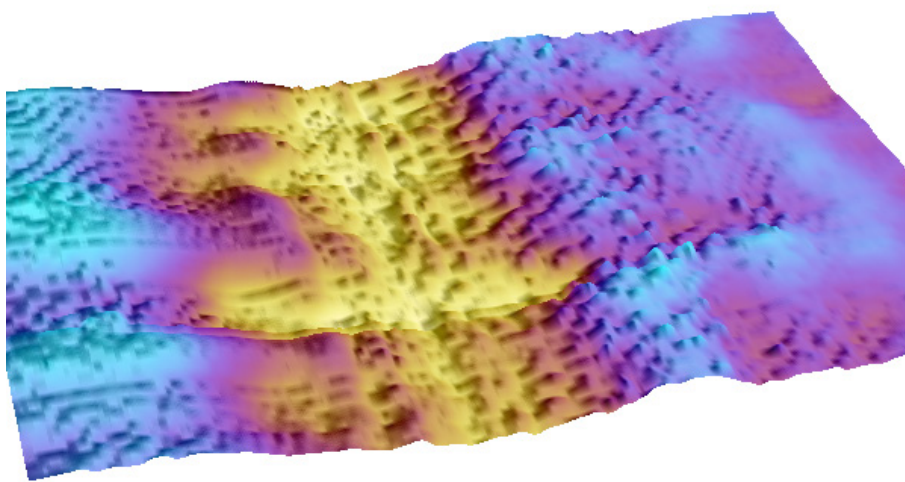
Es sabido que en campos como la Fusión por Confinamiento Inercial, la presencia de pequeños defectos tanto en la superficie del blanco como en la deposición de energía pueden provocar el crecimiento de inestabilidades que impidan la ignición de la cápsula. A pesar de que los plasmas usados como amplificadores de radiación son menos propensos a desarrollar inestabilidades hidrodinámicas, sería deseable estudiar el efecto que estos defectos puedan tener en los parámetros atómicos y en el haz amplificado, ya que la ganancia y por ende la energía obtenida dependen fuertemente de la densidad y temperatura electrónica. Si estos defectos indujeran fuertes inhomogeneidades en el plasma, podrían producirse zonas de alta y baja ganancia mezcladas, pudiendo afectar esto a la calidad del haz láser amplificado.

El estudio teórico de la importancia que pueden tener estos defectos, tanto en el pulido del blanco como en el perfil espacial del láser es realmente complicado. Por ello, las simulaciones y los experimentos son de vital importancia para tratar de cuantificar su impacto.

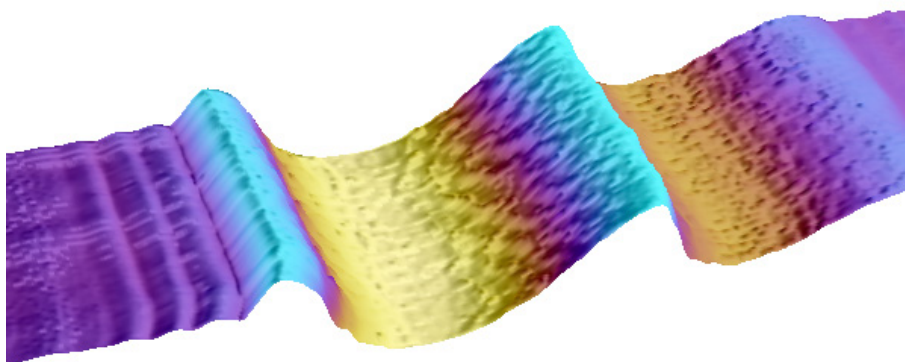
En este capítulo se explicarán las simulaciones que se han realizado (ver [65]), empezando por la rugosidad del blanco, seguidas de defectos en el láser que crea el plasma y finalizando con defectos en el pulso corto que crea la inversión de población.

7.2. Rugosidad del blanco

Existe constancia experimental de que los defectos en el blanco degradan la calidad y la energía del haz láser amplificado. Al representar gráficamente la energía medida en el haz láser amplificado se observa que ésta disminuye al aumentar el número de *disparos* sobre la misma zona del blanco. Esto es debido al daño producido en el blanco por los láseres.



(a) Un tiro - (escala de color amarillo $-2,5 \mu\text{m}$ azul $0,8 \mu\text{m}$)



(b) Izquierda 200 tiros; derecha 100 tiros (escala de color amarillo $-47 \mu\text{m}$ azul $15 \mu\text{m}$)

Figura 7.1: Imágenes 3D reconstruidas a partir de los perfiles de la superficie realizados en el *Institut d'Optique* por A. Jérôme y M.-F. Ravet. Imagen obtenida de [12].

Sin embargo, existen muchos menos datos experimentales sobre el impacto que la rugosidad del blanco (es decir, cuánto debemos pulir éste para obtener

resultados óptimos) tiene en el haz amplificado. En [98] se demuestra la importancia que la rugosidad del blanco tiene a la hora de crear láseres XUV. En dicho experimento se alcanzó el régimen de saturación en Paladio níquelode ($\lambda = 14,7nm$, $J = 0-1$), obteniendo valores de $g_0 \cdot l = 15,8$ y $g_0 = 8,3cm^{-1}$. El blanco consistía en una placa de Paladio, pulida finamente. Cuando se usó un blanco mecanizado convencionalmente la intensidad del haz XUV se redujo drásticamente y el umbral de energía necesaria en el láser infrarrojo para producir emisión XUV bajó de $8,4TW/cm^2$ a $6,6TW/cm^2$.

En esta sección se va a estudiar de manera simplificada el impacto que las rugosidades del blanco pueden tener en la evolución del plasma y la creación de ganancia. En este caso, el plasma se crea enfocando un láser de longitud de onda $\lambda = 0,8\mu m$ en un blanco de hierro. El perfil espacial es hipergaussiano, con un *Full Width at Half Maximum* de $100 \mu m$ y la duración es de 400 ps. La energía de éste láser es de 200 J/m. Los electrones libres del plasma se calientan con un láser de las mismas características, de 5 ps de duración y 300 J/m de energía. La rugosidad se simuló como una perturbación sinusoidal de $5 \mu m$ de amplitud y una longitud de onda de $\lambda = 10\mu m$ en la superficie del blanco. Esta perturbación, presente desde el inicio de la simulación, afecta notablemente a la dinámica del plasma, apareciendo un complicado patrón de velocidades y una clara perturbación en la densidad.

En el plasma aparecen tres zonas diferenciadas, dependiendo de la distancia al blanco. Estas zonas se aprecian claramente en la densidad electrónica (figura 7.2). En las zonas cercanas a éste ($Y \geq 30\mu m$) el efecto de la perturbación es muy fuerte, y los distintos parámetros que caracterizan el plasma presentan oscilaciones. Es en esta zona donde se encuentra la densidad crítica y por tanto la absorción de la energía del láser está fuertemente condicionada por la perturbación.

Estas perturbaciones que aparecen en el plasma se van atenuando según nos alejamos del blanco, debido al efecto homogeneizante de la expansión del plasma, así como de la conducción electrónica. En esta zona central ($20 \mu m \leq Y \leq 30\mu m$) tenemos un plasma mucho más suave, con menos gradientes de densidad y temperatura (aunque éstos sigan existiendo), favoreciendo la creación de ganancia.

Finalmente las perturbaciones vuelven a aparecer en la zona más alejada del plasma ($Y \leq 20\mu m$). Esta zona está formada por la materia ablacionada inicialmente, la densidad es baja y su expansión ha sido principalmente en la dirección Y, por lo que el efecto de homogeneización ha sido mucho menor.

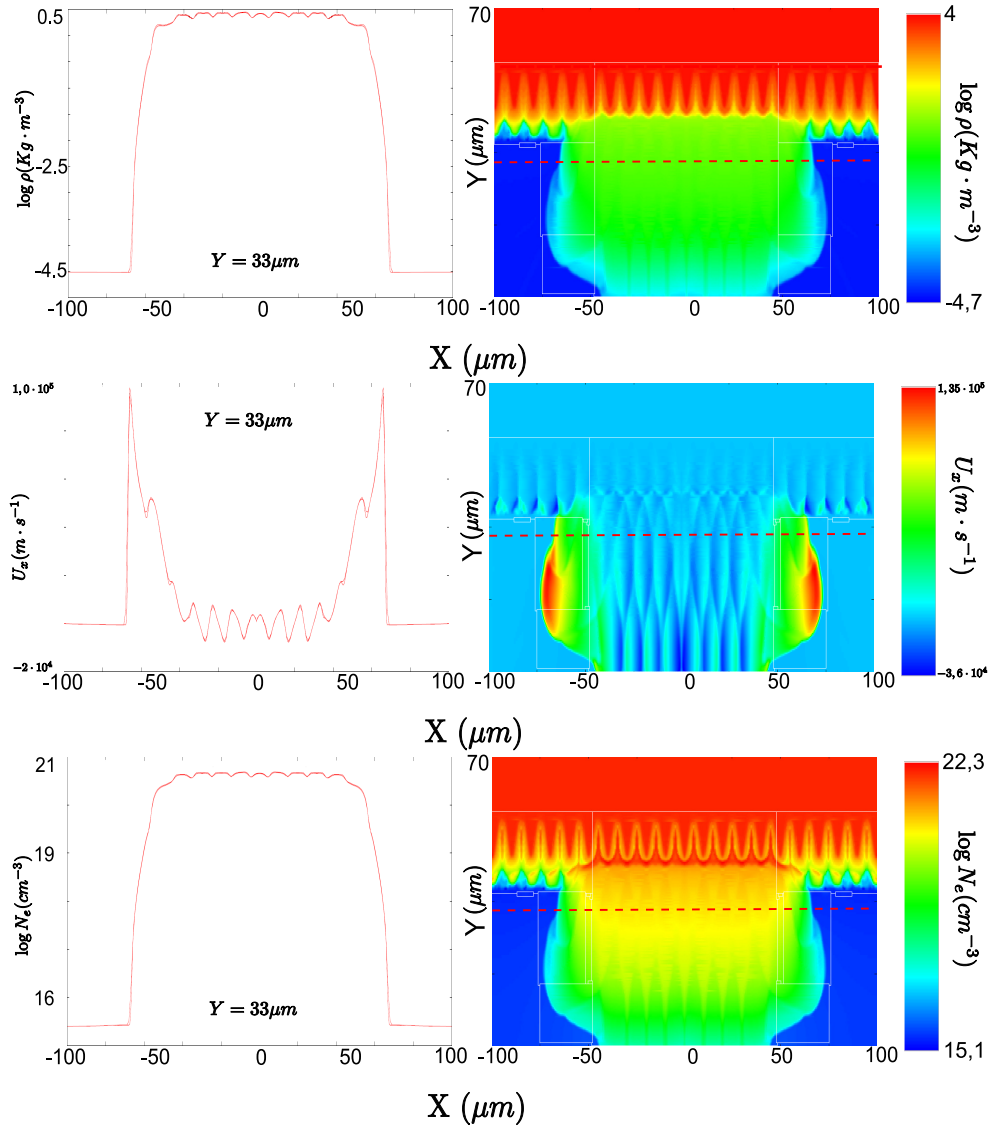


Figura 7.2: Densidad, velocidad horizontal y densidad electrónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.

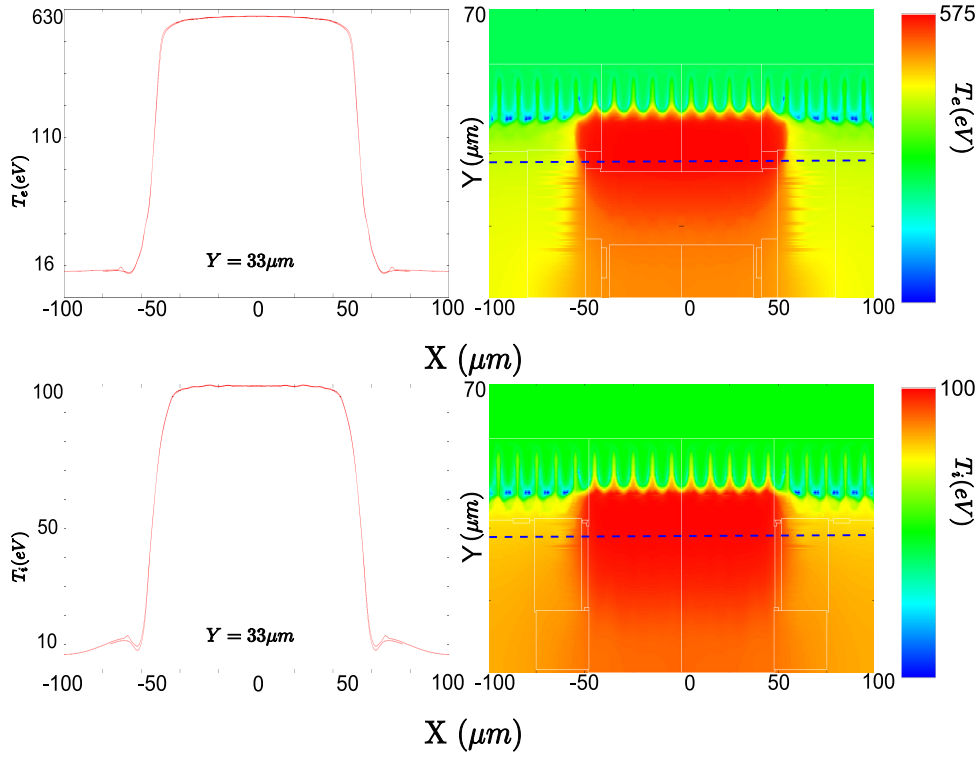


Figura 7.3: Temperatura electrónica e iónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.

Por el contrario, la temperatura, tanto electrónica como iónica, no se ve afectada por la inhomogeneidad del plasma. El efecto difusivo de la conducción electrónica mitiga la perturbación, obteniéndose zonas muy homogéneas, como puede observarse en la figura 7.3.

En la figura 7.4 se muestra el mapa de ganancia de este caso. Las tres zonas descritas anteriormente se observan claramente en dicha figura. En la zona superior, $Y = 40 \mu m$ aparece una zona con huecos dentro de la ganancia, provocados por existencia o ausencia de suficientes iones neonoides. Esto es debido a la fuerte oscilación de densidad que hay en esa zona, ya que está cerca de la superficie perturbada y se ve fuertemente influenciada por ésta. La ganancia crece según nos alejamos del blanco, a la vez que las oscilaciones se van atenuando, hasta que se alcanza el valor máximo de $g_0 \approx 90 cm^{-1}$ en $Y = 33 \mu m$. En esta zona la ganancia es relativamente homogénea y no presenta oscilaciones visibles, ya que estamos en la segunda zona de las descritas anteriormente. Una vez traspasada la zona de máxima

ganancia, ésta comienza a decaer y, a partir de $Y = 20 \mu\text{m}$, las oscilaciones vuelven a ser visibles. Se ha alcanzado la zona de baja densidad que no ha llegado a homogeneizarse. Sin embargo, en esta zona el valor de la ganancia es $g_0 \leq 10$ (menos del 11 % del valor máximo) por lo que esta zona tiene menos interés que las anteriores.

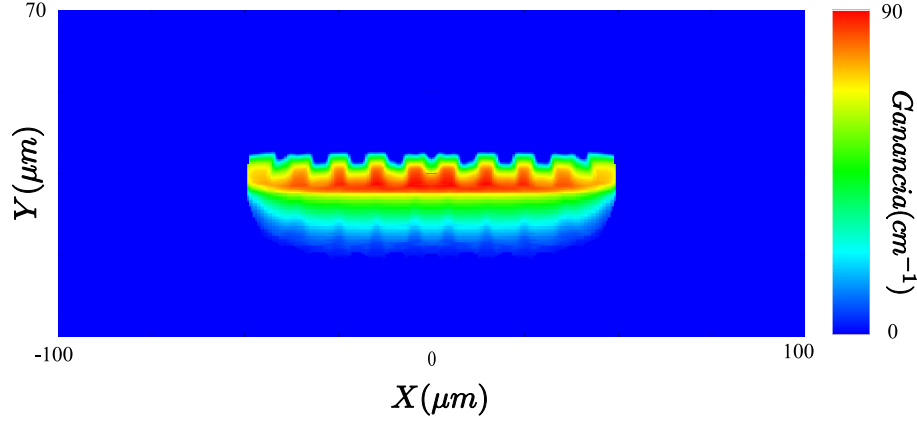


Figura 7.4: Mapa de ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa.

Como se ha mostrado en la figura 7.2 el plasma presenta oscilaciones de densidad en la zona donde el láser de bombeo ha de propagarse y depositar su energía para crear la ganancia. Estos gradientes de densidad electrónica pueden refractar el haz láser, afectando a la deposición de energía y, por tanto, a la ganancia. Por ello se realizaron simulaciones usando la subrutina de *ray-tracing* descrita en 3.8.2 para tener en cuenta estos efectos.

En este caso, dos láseres de idénticas características que en el caso anterior (misma energía y duración temporal) se enfocan en la lámina de hierro para obtener, de nuevo, un perfil hipergaussiano de $\text{FWHM} = 100 \mu\text{m}$. Para ello se supone en la subrutina de trazado de rayos que hay una lente de distancia focal $f = 50\text{cm}$, colocada a 49.86 cm de la lámina (si tomamos el origen de coordenadas en la esquina inferior de la ventana de simulación, la lente está colocada en $Y = -49,855\text{cm}$). Así, el haz láser penetra con cierto ángulo en el plasma perturbado, interaccionando con los gradientes de densidad electrónica creados por la rugosidad del blanco.

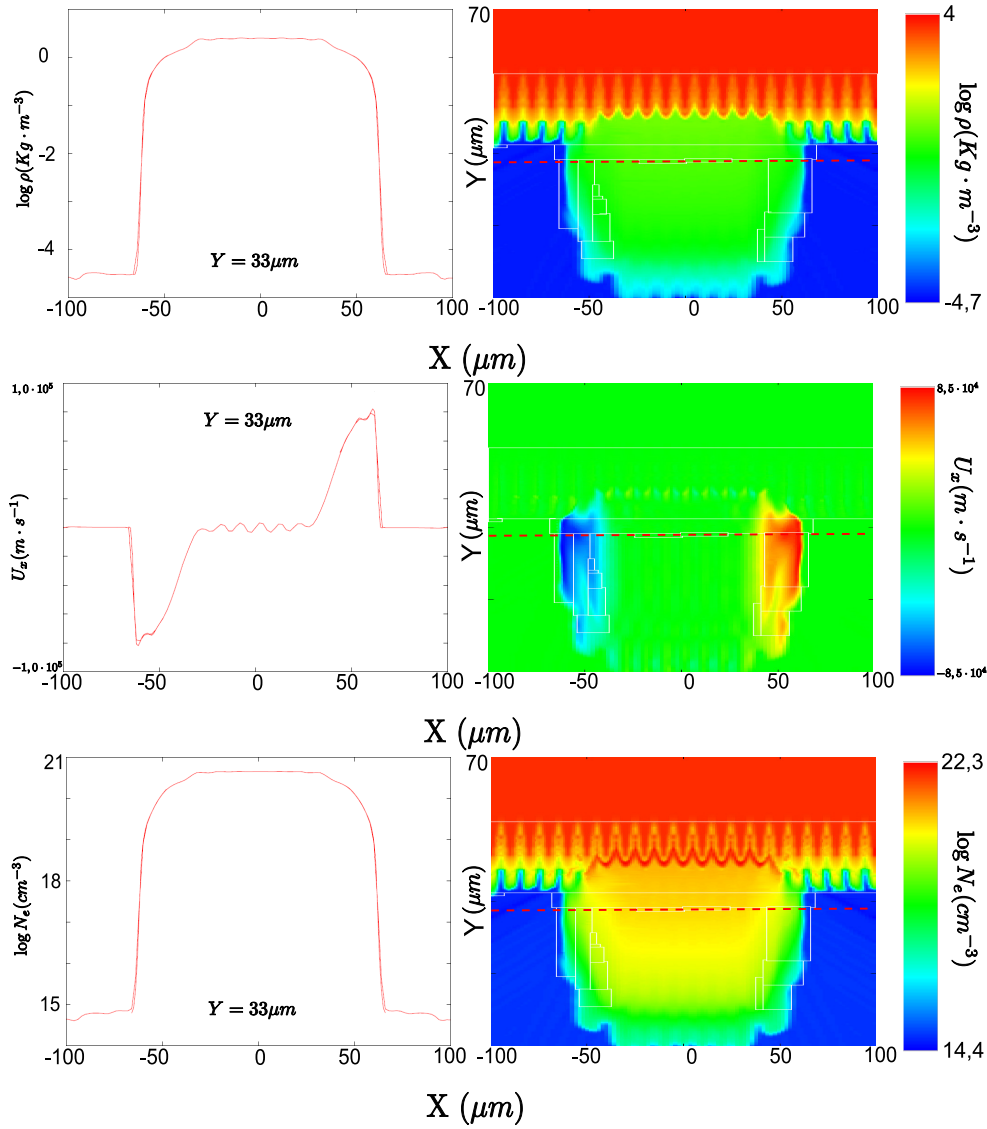


Figura 7.5: Densidad, velocidad horizontal y densidad electrónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. En esta simulación se ha utilizado la subrutina de trazado de rayos para modelar la deposición láser. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.

Comparando las figuras 7.2 y 7.5 se observa una clara disminución de la perturbación al usar la subrutina de trazado de rayos. Éstas pueden observarse aún en la velocidad horizontal, pero la densidad total y electrónica apenas presentan oscilaciones visibles en esta zona central del plasma. Así mismo,

como era de esperar, los perfiles de temperaturas tampoco presentan perturbaciones demasiado grandes, como se muestra en la figura 7.6.

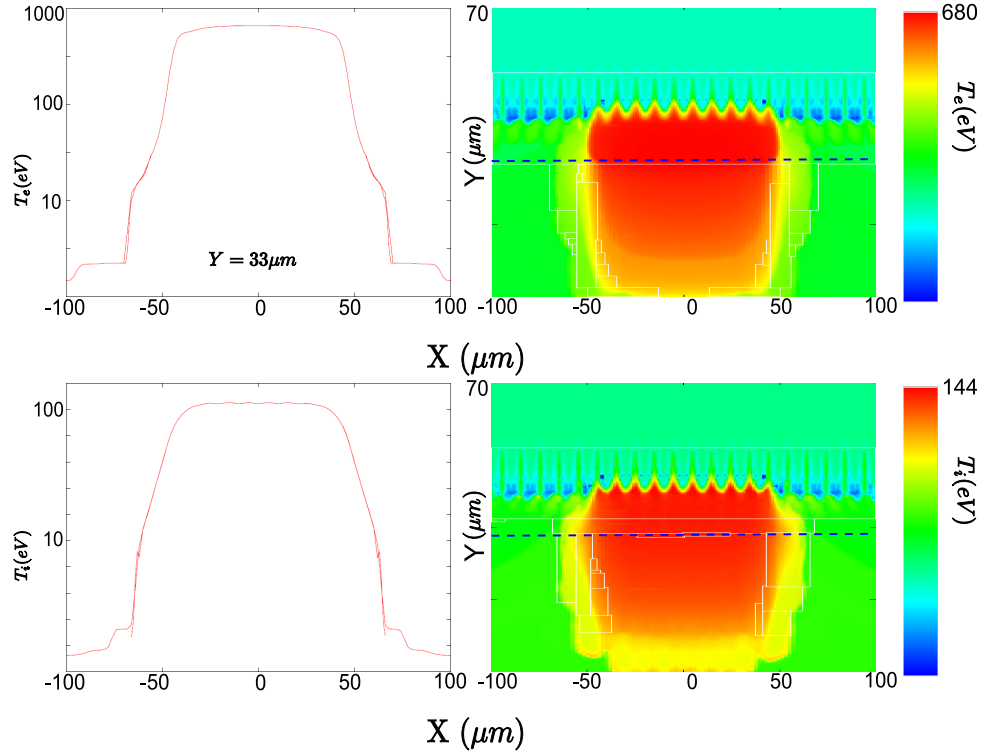


Figura 7.6: Temperatura electrónica e iónica en el momento de máxima ganancia para un plasma creado a partir de una lámina rugosa. A la izquierda se representan los cortes horizontales en la zona de máxima ganancia ($Y = 33 \mu m$). Este corte se corresponde a la línea de trazos en los mapas 2D.

En la figura 7.7 se muestra la zona de ganancia obtenida. Se observa que el valor máximo de la ganancia es superior al obtenido en el caso anterior y, a su vez, el área donde puede haber amplificación es mayor en este caso. Esto puede explicarse teniendo en cuenta las diferencias en la deposición de energía de los láseres.

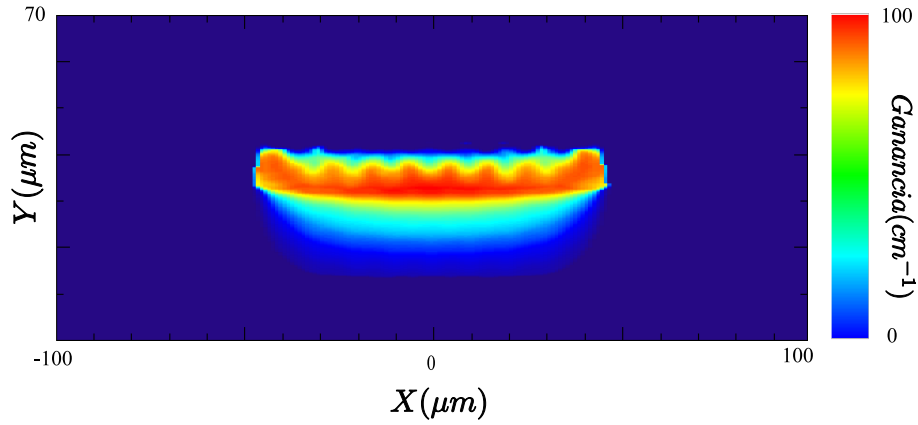


Figura 7.7: Mapa de ganancia de un plasma con rugosidades simulado usando subrutinas de trazado de rayos.

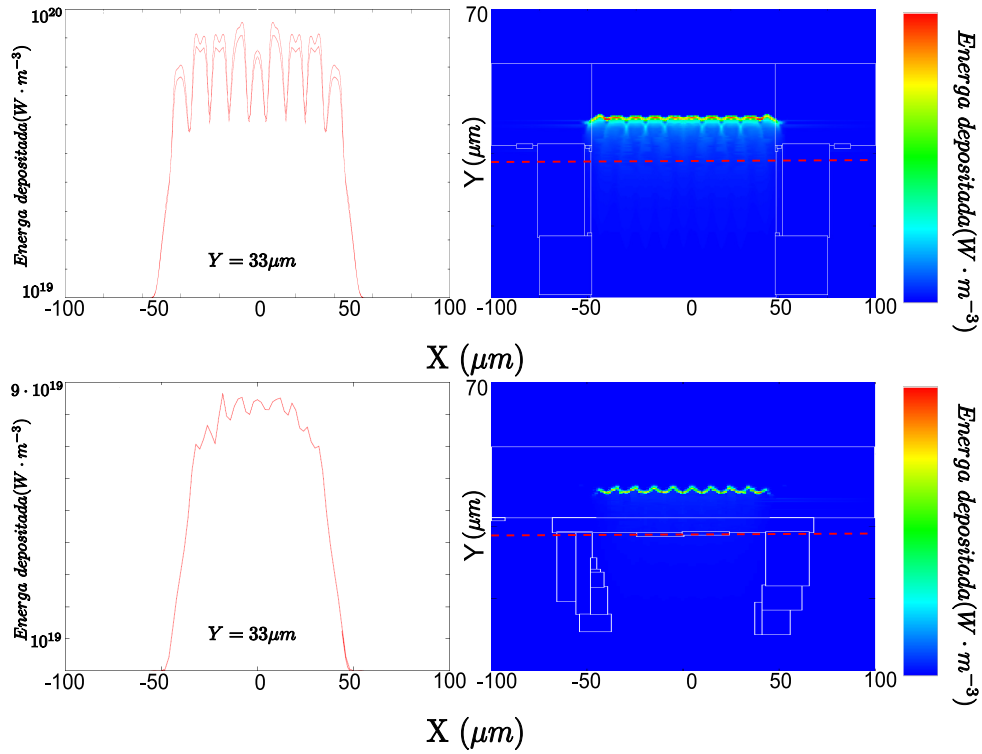


Figura 7.8: Mapas 2D de deposición de energía (derecha) y cortes horizontales de la deposición de energía en la zona de máxima ganancia (el corte está indicado por una línea a trazos) para el caso usando subrutinas de deposición de la energía láser simples (arriba) y usando trazado de rayos (abajo).

En la figura 7.8 se muestra la deposición de energía del láser en el caso en el que se usa un modelo simple (arriba) y en el que se tienen en cuenta los efectos de refracción mediante trazado de rayos (abajo). En dicha figura se observa que las oscilaciones en la deposición de energía son menores en el caso del trazado de rayos, obteniendo pues un plasma más homogéneo que en el caso simple. Los efectos de refracción distribuyen eficientemente la energía en la zona de ganancia y, para modelar estas perturbaciones en el plasma, es necesario tenerlos en cuenta.

Por último, se usó el código SHADOX [71, 56] para estudiar el impacto de estas inhomogeneidades en la zona de ganancia. Para ello se inyectaron 0.1 nJ de armónicos de longitud de onda $\lambda = 25,5nm$ enfocados en una elipse de ejes con longitudes de $100 \mu m$ y $40 \mu m$ (es decir, maximizando la superposición entre el haz inyectado y la zona de ganancia). El haz se inyectó en incidencia normal, ya que la optimización de la inyección queda fuera de los objetivos de este trabajo, estando interesados en cómo afecta al haz amplificado la rugosidad inicial del blanco. En la figura 7.9 se muestran los haces obtenidos al atravesar un milímetro de plasma. En dicha figura se

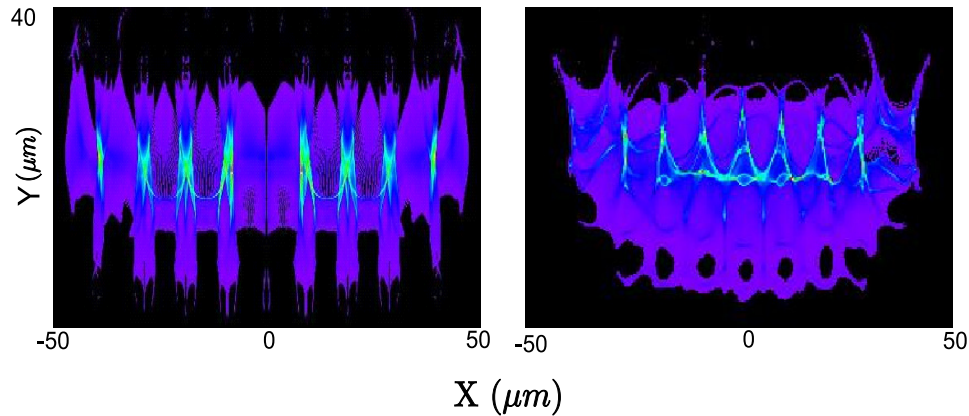


Figura 7.9: Haz amplificado al atravesar un milímetro de plasma. En el caso de la izquierda (A) el plasma se simuló con la subrutina simple de deposición de energía; en el de la derecha (B) se usó la subrutina de trazado de rayos.

observa claramente que las perturbaciones desarrolladas en el plasma afectan fuertemente al haz amplificado. El haz obtenido no es homogéneo en ningún caso y presenta zonas en las que éste desaparece completamente. Así mismo, como era de esperar, el haz obtenido al inyectar los armónicos en el plasma tratado con subrutinas simples de deposición de energía (figura 7.9.A) presenta más irregularidades que el plasma simulado usando trazado de rayos (figura 7.9.B), ya que las inhomogeneidades del plasma eran mayores en el primer caso.

7.2.1. Conclusiones

En esta sección se ha estudiado el impacto de los defectos presentes en el blanco (rugosidad o daños por tiros anteriores) en la evolución del plasma, la creación de la ganancia y la amplificación del haz inyectado. Se ha demostrado que estos defectos tienen un fuerte impacto perjudicial en la homogeneidad del plasma y del haz amplificado, en concordancia con experimentos [98]. Así mismo se ha identificado la necesidad de usar subrutinas de trazado de rayos para estudiar la evolución de estos plasmas, ya que las perturbaciones en la densidad electrónica hacen que la refracción del haz juegue un papel importante en la deposición de la energía. Estos efectos de refracción ayudan a homogeneizar la deposición de energía, reduciendo ligeramente la perturbación inicial, aunque ésta siga presente y afecte, aunque en menor medida, al haz amplificado.

7.3. Inhomogeneidades en los láseres

Como se explica en el capítulo 5, el perfil espacial del haz láser tiene un gran impacto en la dinámica del plasma y en la generación de ganancia, favoreciendo o inhibiendo efectos bidimensionales en los laterales del plasma. Es de esperar pues que posibles defectos en el perfil espacial del láser (debidos a pequeñas imperfecciones en las lentes, alineación, frente de ondas del haz, etc ...) afecten al plasma. Debido a la diferencia de tiempos de actuación, se han estudiado por una parte los defectos en el pulso principal que crea el plasma y por otra los defectos en el pulso corto que genera la inversión de población. Estos defectos se han simulado como una perturbación sinusoidal de amplitud variable y longitud de onda $\lambda = 10\mu m$ sobre un perfil hipergaussiano ($n=10$).

Los parámetros de las simulaciones son los indicados en la sección 7.2, con la diferencia de que el blanco es ahora una lámina plana de hierro y la perturbación se encuentra, o bien en el perfil espacial del pulso principal, encargado de crear el plasma, o bien en el perfil espacial del pulso corto, encargado de calentar el fluido electrónico y crear la inversión de población. Se ha estudiado el impacto de estas perturbaciones por separado, para facilitar la extracción de conclusiones.

7.3.1. Pulso principal

En este caso, el pulso largo, encargado de calentar el plasma hasta obtener los iones neonoides, presenta una perturbación sinusoidal como la explicada

anteriormente. La amplitud de esta perturbación se ha variado de una simulación a otra, siendo sus valores del 1 %, 2.5 % y 5 % (el porcentaje se toma respecto al máximo del perfil de distribución espacial de energía).

Como una medida de la perturbación inducida por el perfil láser se ha utilizado un *contraste* definido sobre la temperatura. Sobre un corte horizontal en la zona con densidad electrónica $n_e = 0,25n_c$ se ha calculado el cociente entre la diferencia de valores máximo y mínimo y la temperatura media:

$$\Delta T = \frac{T_{max}(y_0) - T_{min}(y_0)}{\frac{T_{max}(y_0) + T_{min}(y_0)}{2}} \quad (7.1)$$

El contraste se ha calculado en distintos momentos de la evolución del plasma ya que es de esperar que, contra más tiempo actúe el láser perturbado, mayor será la inhomogeneidad del plasma. En la figura 7.10 se representa el contraste medido cada 25 ps a partir de $t = 750ps$ en plasmas creados con láseres con diferente grado de inhomogeneidad.

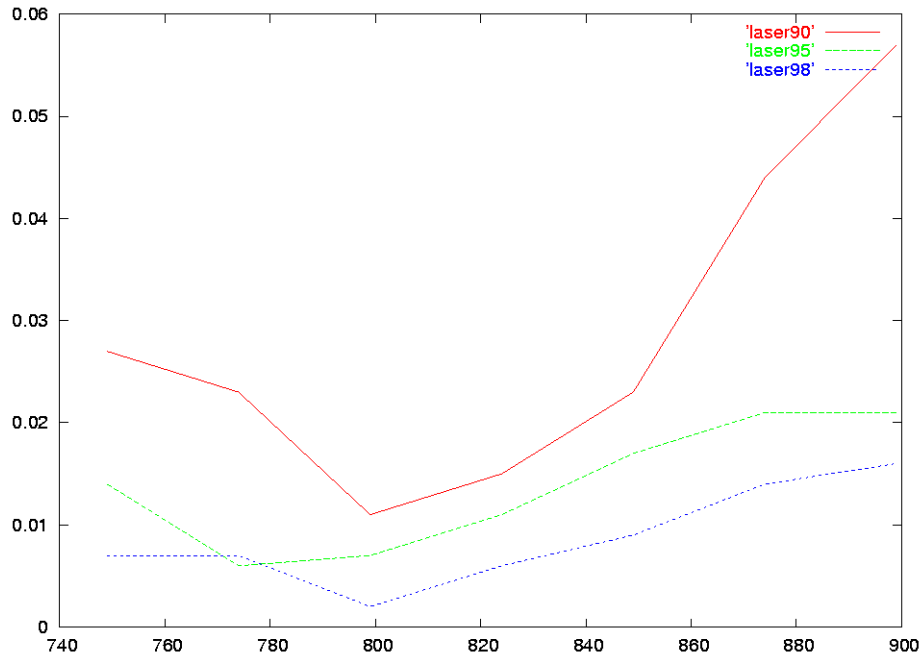


Figura 7.10: $\Delta T/T$ Vs tiempo para tres amplitudes diferentes: 5 % (rojo), 2.5 % (verde) y 1 % (azul)

En dicha figura se observa una tendencia similar del contraste de temperaturas en los tres casos: éste se reduce en los primeros instantes, debido a la

rápida expansión inicial del plasma y después tiende a aumentar debido a que el láser sigue depositando energía con irregularidad. Así pues, el retraso entre el pulso largo que calienta el plasma y el pulso corto que crea la inversión de población es un parámetro que puede ser variado para obtener la ganancia en el momento de mayor homogeneidad.

Así mismo, en la figura 7.10 se observa que el contraste crece con el tiempo mucho más rápidamente en el caso de mayor perturbación en el haz que en los dos casos restantes. En estos últimos el contraste de temperaturas crece de manera similar. Una perturbación del 5 % hace crecer el contraste de temperaturas muy rápidamente y reducirla hasta un valor del 2.5 % permite obtener una mejora sustancial. Sin embargo, la mejora al intentar homogeneizar el haz láser más todavía (caso de 1 %) no es tan notable y puede no compensar el esfuerzo necesario. En conclusión, las inhomogeneidades en el láser largo afectan fuertemente al plasma si éstas son grandes y es necesario reducirlas para obtener un plasma lo más homogéneo posible. Sin embargo, no es necesario reducirlas al máximo, ya que el costo puede ser superior al beneficio. Por ello, existe un nivel máximo de inhomogeneidades tolerables en el haz láser largo.

Pulso corto

En este caso el plasma es creado mediante un pulso sin perturbar y es bombeado con un pulso con perturbación sinusoidal en su perfil espacial. Así pues, esta perturbación sólo puede transmitirse a la temperatura electrónica del plasma y los perfiles de densidad electrónica, temperatura iónica y velocidades no presentan perturbaciones, ya que han sido creados mediante un láser homogéneo.

En la figura 7.11 se muestran los mapas bidimensionales en falsos colores de los diferentes parámetros de interés en el plasma, a saber: densidad, densidad electrónica, velocidades de expansión, temperatura iónica e ionización media. La temperatura electrónica se mostrará más tarde ya que ésta se ve afectada por la perturbación en el láser corto. Como se ha explicado anteriormente (y era de esperar), el plasma presenta una zona central, con iones neonoides, donde tendrá lugar la ganancia. Es en esta zona donde se producirá la absorción del láser corto y donde podrán aparecer las perturbaciones.

En las figuras 7.12, 7.13 y 7.14 se muestran los mapas en falso color de la temperatura electrónica en un intervalo temporal desde 4 ps antes de la llegada del máximo hasta 4 ps después (el pulso tiene un perfil temporal gaussiano con un FWHM de 5 ps). También se muestran en las figuras cortes horizontales de la temperatura (señalados con una línea de trazos en los mapas) para observar la evolución de las perturbaciones.

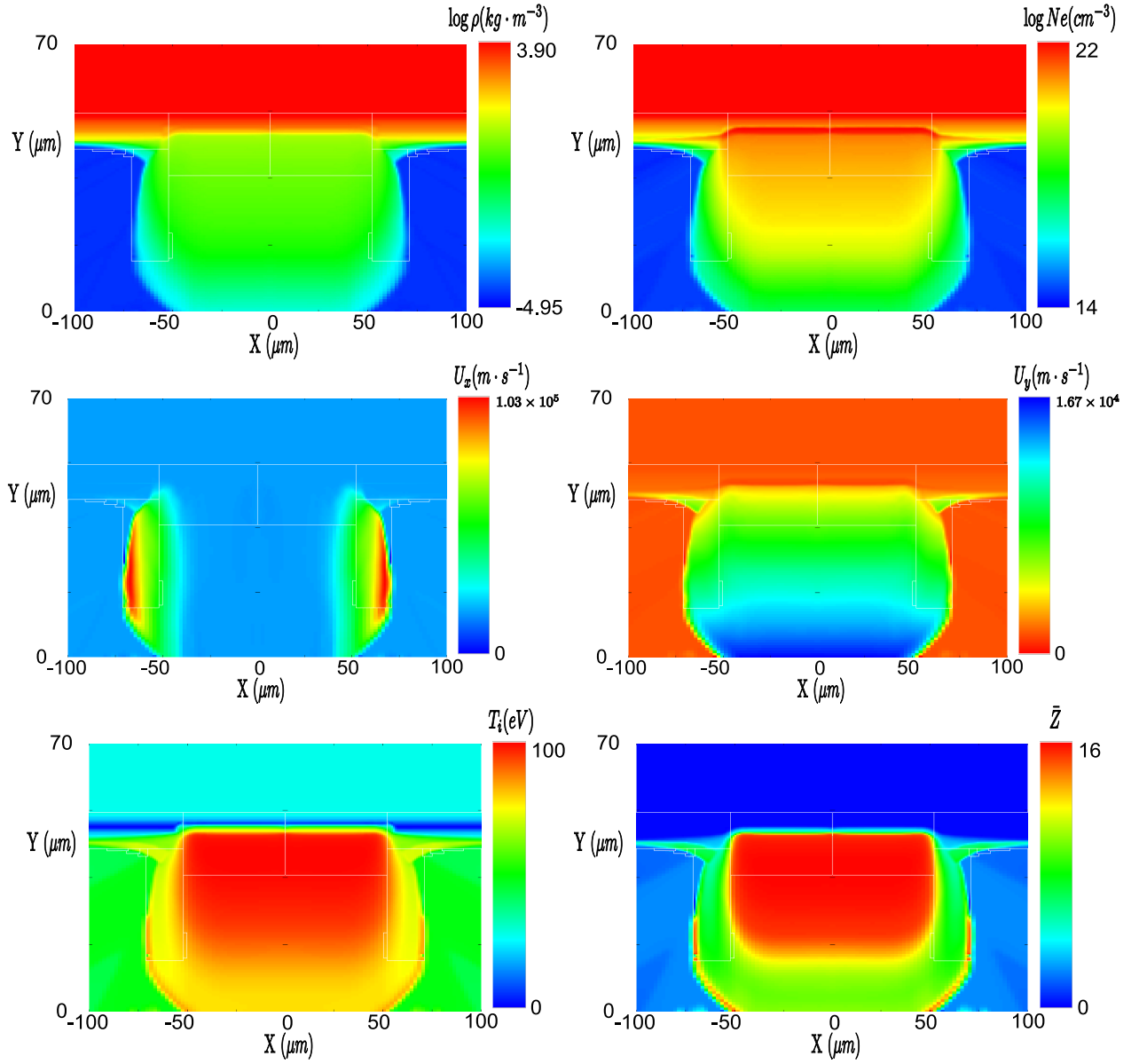


Figura 7.11: Densidad, densidad electrónica, velocidad horizontal, velocidad vertical, temperatura iónica e ionización media en el plasma antes de la llegada del pulso corto perturbado.

En la figura 7.12.c empieza a aparecer la perturbación inducida por el láser en la temperatura electrónica, en forma de una oscilación en ésta. La perturbación crece, alcanzando los valores máximos después de la llegada del pulso (figuras 7.13.b y 7.13.c).

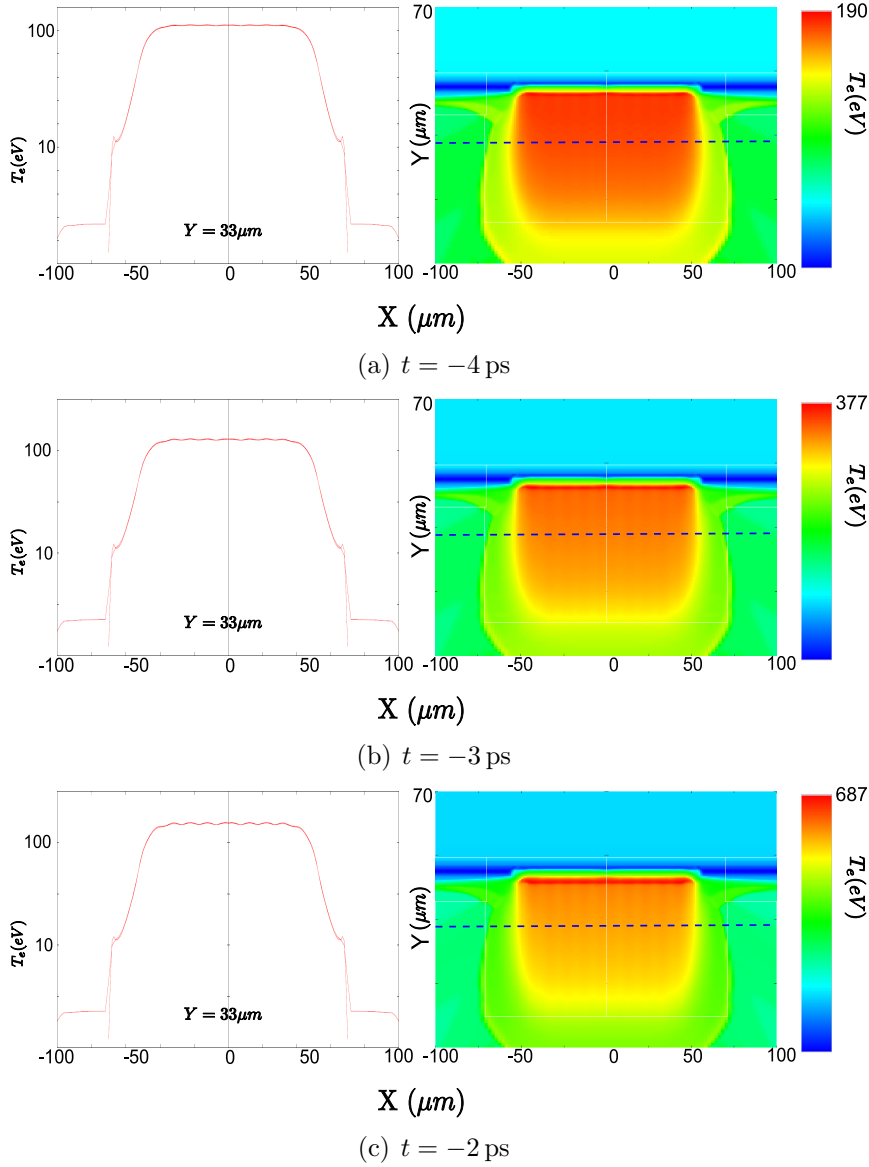


Figura 7.12: Mapas bidimensionales en falsos colores de temperatura electrónica y corte horizontal de ésta en la zona de ganancia (señalado mediante la línea a trazos) para distintos momentos temporales: a) 4 ps antes de llegar el máximo del láser, b) 3 ps antes, c) 2 ps antes.

Sin embargo, la corta duración del pulso láser no permite el crecimiento de la perturbación, que desaparece rápidamente gracias al efecto homogeneizador de la conducción electrónica (figuras 7.14.b y 7.14.c). Así pues, las perturbaciones espaciales en en láser corto no afectan de manera sensible a

CAPÍTULO 7. ESTUDIO DEL IMPACTO DE MODULACIONES DE PEQUEÑA ESCALA

la temperatura electrónica, salvo en un corto periodo de tiempo cerca del máximo del haz láser.

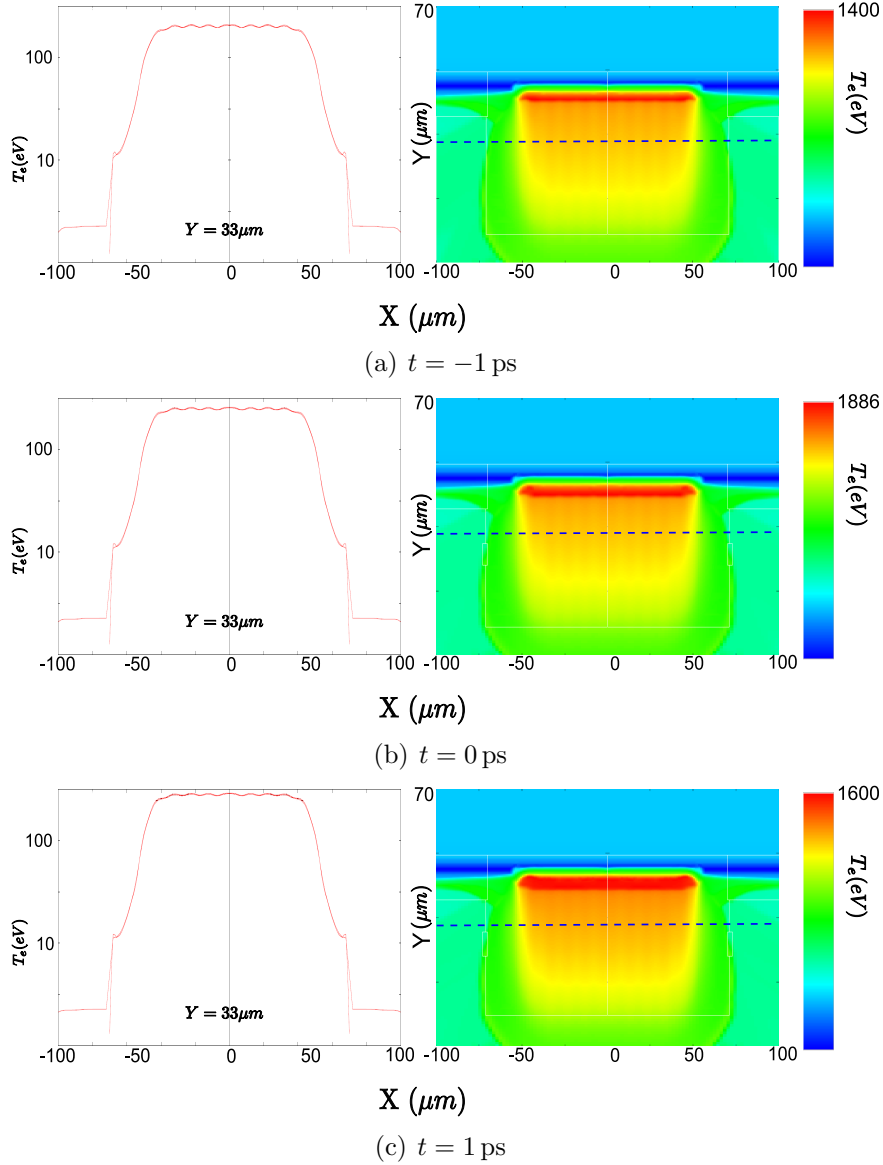


Figura 7.13: Mapas bidimensionales en falsos colores de temperatura electrónica y corte horizontal de ésta en la zona de ganancia (señalado mediante la línea a trazos) para distintos momentos temporales: a) 1 ps antes de llegar el máximo del láser, b) en el máximo del láser, c) 1 ps después.

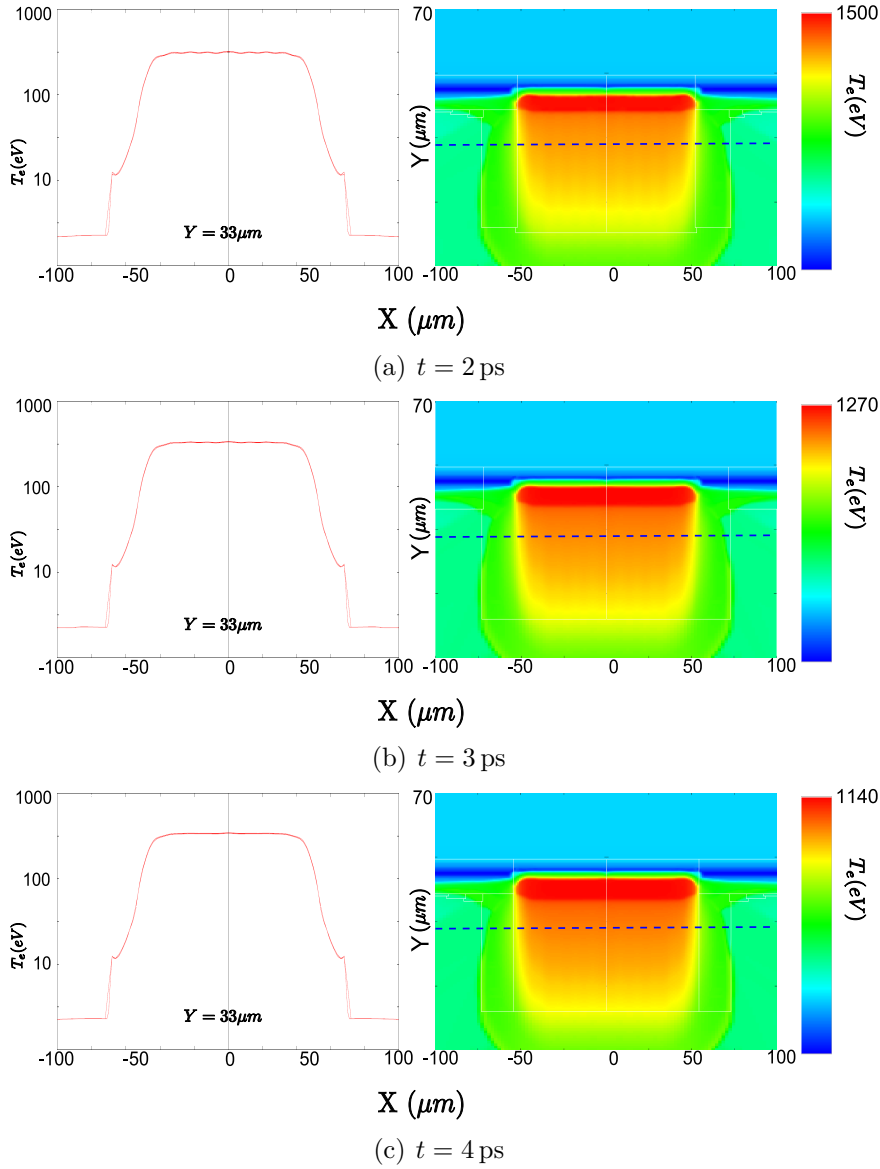


Figura 7.14: Mapas bidimensionales en falsos colores de temperatura electrónica y corte horizontal de ésta en la zona de ganancia (señalado mediante la línea a trazos) para distintos momentos temporales: a) 2 ps después de llegar el máximo del láser, b) 3 ps después, c) 4 ps después.

7.4. Conclusiones

En este capítulo se ha estudiado de manera breve el impacto en la evolución del plasma que tienen los defectos que pueda haber en el pulido de la superficie y en el perfil espacial del láser. Estos defectos se han modelado en todos los casos como una perturbación sinusoidal, de longitud de onda de $\lambda = 10\mu m$ y amplitud variable. Se ha comprobado que los defectos en el pulso corto afectan muy poco a las propiedades del plasma: éste pulso actúa durante unos pocos picosegundos y sólo modifica la temperatura electrónica del plasma por lo que el resto de parámetros hidrodinámicos (temperatura iónica, densidad electrónica, velocidades) presentan un perfil sin perturbar. La perturbación en la temperatura electrónica no se ve amplificada debido a la corta duración del pulso láser y desaparece rápidamente gracias al efecto difusivo de la conducción térmica electrónica.

Las perturbaciones del pulso largo disponen de más tiempo (varias centenas de ps e incluso ns) para desarrollarse y afectar a la evolución del plasma. Así pues, todos los parámetros hidrodinámicos del plasma se verán afectados, en mayor o menor medida, por esta perturbación. Esto también es cierto para la temperatura electrónica en el momento de creación de la ganancia: aunque el láser corto, encargado de calentar el fluido electrónico, no esté perturbado, ha de absorberse en un medio en el que la densidad electrónica presenta perturbaciones y por tanto éstas se transmitiran a través de la absorción por Bremsstrahlung Inverso a la temperatura electrónica. Se ha comprobado que una reducción de la perturbación en el perfil del láser permite obtener un plasma más homogéneo. Sin embargo, a partir de cierto umbral el aumento de homogeneidad en el plasma no es elevado, por lo que un nivel de perturbación en el haz láser puede ser aceptable.

Finalmente se ha demostrado que las perturbaciones en el pulido del blanco son las más perjudiciales para la creación de una zona de ganancia homogénea. Estas perturbaciones, al estar presentes desde la creación del plasma, inducen un complicado esquema de velocidades, provocando fuertes inhomogeneidades en la densidad electrónica y en la absorción del láser. La ganancia se ve fuertemente afectada, presentando una fuerte modulación y un trazado de rayos posterior para estudiar la amplificación en dicho plasma presenta estructuras muy complejas. Así pues, la capacidad de amplificación del plasma se ve fuertemente degradada, como se demuestra en los experimentos realizados por Tommasini y colaboradores [98] donde se comparan blancos mecanizados de manera estándar y mediante diamante.

Capítulo 8

Trabajos futuros: amplificación

8.1. Introducción

En los capítulos precedentes se ha explicado la modelización que se ha realizado de los plasmas amplificadores de radiación X blanda y los resultados computacionales obtenidos. Para lograr estos resultados se han desarrollado nuevas subrutinas para aumentar las capacidades del código ARWEN y para su postproceso. Con todo ello se ha estudiado la evolución de los plasmas amplificadores, se han optimizado ciertos parámetros como el perfil espacial del láser o se ha dicho cómo deben optimizarse en cada caso concreto (es conveniente que el láser corto llegue al plasma antes que la onda de rarefacción lateral alcance el centro de éste).

El siguiente paso lógico sería estudiar y optimizar la inyección y amplificación de armónicos de alto orden en el plasma. En esta tesis se han hecho ciertas suposiciones conservativas (sección 6.4) para estudiar, al menos cualitativamente, la energía que puede ser extraída de estos amplificadores. Así mismo, en la sección 6.6 se realizaron unos cálculos preliminares en 1D de la amplificación que sufriría un haz de armónicos inyectado en los plasmas estudiados en el mismo capítulo (es decir, el capítulo 6). Éstos cálculos se realizaron integrando mediante diferentes métodos la ecuación 2.48, que expresa la variación de intensidad (y por tanto de energía) que sufre el haz al atravesar el medio activo. Esta aproximación es útil cuando se está interesado en la energía que se puede extraer y, desde luego, permite obtener conclusiones no sólo cualitativas sino también cuantitativas de la efectividad de los diversos amplificadores así como estimaciones de la energía extraída.

Aún así, sería deseable realizar cálculos tridimensionales, teniendo en cuenta, ya no de manera aproximada, los efectos de refracción y los distintos valores de la ganancia en el plasma, así como diversos parámetros

fundamentales en la inyección de armónicos. Para ello se ha acoplado el código de trazado de rayos en 3D SHADOX. Con éste código se puede variar el ángulo, posición, focalización y energía de la semilla a inyectar, con miras a reducir la refracción que sufre el haz en el interior del plasma y aumentar la energía extraíble. Al existir un elevado número de parámetros diferentes que pueden ser variados en SHADOX, una optimización de dichos parámetros sobrepasaría el marco de esta tesis.

El código SHADOX fue programado inicialmente para el estudio de esquemas basados en la Amplificación de la Emisión Espontánea. Por ello no se tuvieron en cuenta los efectos de coherencia y polarización, usando métodos de trazado de rayos por ser rápidos, bien conocidos y fácilmente paralelizables. Sin embargo, como ya se ha explicado, el esquema de inyección de armónicos preserva al amplificar el haz la coherencia y la polarización de la semilla, siendo necesario tener en cuenta estos efectos. Así mismo, como se explicó en 6.6, existe la necesidad de usar un pre-amplificador y uno o varios amplificadores debido a los diferentes anchos espectrales de los armónicos y la ganancia. Es pues necesario tener en cuenta la propagación de un haz coherente en el vacío. Por todas estas razones es necesario utilizar un formalismo más avanzado, como pueden ser las ecuaciones de Maxwell-Bloch [58]. Esta aproximación se ha aplicado recientemente al estudio de estos amplificadores [52, 5, 47, 48] y sería interesante repetir los cálculos de amplificación 1D realizados con este formalismo e incluso modificar el código SHADOX para tener en cuenta estas dependencias. Por todo ello, se expondrá brevemente en este capítulo las bases de estas ecuaciones.

8.2. Las ecuaciones de Maxwell-Bloch

El modelo de amplificación de la radiación en el plasma descrito y usado en esta tesis (y en programas como SHADOX) presenta ciertas limitaciones a la hora de estudiar ciertas propiedades de la radiación de salida. Por un lado, al estudiar únicamente el comportamiento de la intensidad (o equivalentemente de la energía) al atravesar un medio con una ganancia y fluencia de saturación dadas 4.1, 4.2, no es posible investigar propiedades importantes como la coherencia del haz, ya que la intensidad es proporcional al cuadrado del campo eléctrico. Así mismo, al ser estos parámetros (ganancia y fluencia de saturación) constantes durante la propagación del haz, no se puede estudiar los efectos de variación temporal de éstos valores.

El formalismo de Maxwell-Bloch permite tener en cuenta estos efectos al resolver consistentemente las ecuaciones de Maxwell del campo electromagnético acopladas con un modelo mecanocuántico de las poblaciones de

los niveles. Para facilitar su resolución, es necesario simplificar considerablemente estas ecuaciones. Aquí se presentará un modelo de ecuaciones de Maxwell-Bloch tal y como se explica en [93] ya que tiene en cuenta la polarización del haz. En caso de que no fuera necesario tenerla en cuenta, se podrían usar modelos más simples [52, 5].

La ecuación de ondas para el campo eléctrico en un plasma neutral toma la forma

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \frac{\omega_e^2}{c^2} \mathbf{E} = \frac{1}{\epsilon_0 c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial t^2} \quad (8.1)$$

donde $\mathbf{E} \equiv \mathbf{E}(x, y, z, t)$ es el campo eléctrico, $\mathbf{P} \equiv \mathbf{P}(x, y, z, t)$ la polarización y ω_e la frecuencia del plasma.

Suponiendo que la radiación se propaga unicamente en la dirección Z, la componente del campo eléctrico en esta dirección ha de anularse $E_z = 0$. Introduciendo los vectores unitarios

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{-\mathbf{i} + i\mathbf{j}}{\sqrt{2}} \\ \mathbf{e}_{-1} &= \frac{\mathbf{i} + i\mathbf{j}}{\sqrt{2}} \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{k} \end{aligned}$$

se puede descomponer el campo eléctrico como suma incoherente de campos eléctricos polarizados circularmente a izquierdas y derechas:

$$\mathbf{E}_{\sigma+} = \tilde{E} e^{i(\omega t - kz + \phi_+)} \mathbf{e}_1 - \tilde{E} e^{-i(\omega t - kz + \phi_+)} \mathbf{e}_{-1} \quad (8.2)$$

$$\mathbf{E}_{\sigma-} = -\tilde{E} e^{-i(\omega t - kz + \phi_-)} \mathbf{e}_1 + \tilde{E} e^{i(\omega t - kz + \phi_-)} \mathbf{e}_{-1} \quad (8.3)$$

donde $\tilde{E} = -E/\sqrt{2}$.

El vector polarización se obtiene de $\mathbf{P} = Tr(\rho \mathbf{d})$, donde ρ es el operador densidad y \mathbf{d} el dipolo eléctrico atómico. Una expresión equivalente es

$$\begin{aligned} \mathbf{P} = & \sum_{q=-1,0,1} \sum_M [\langle JM | \rho | J'M - q \rangle \rho_{J'M-q, JM} + \\ & (-1)^q \langle JM | d_{-q} | J'M + q \rangle \rho_{JM, J'M+q}] \mathbf{e}_q \end{aligned} \quad (8.4)$$

donde $\rho_{JM, J'M'} = \langle JM | \rho | J'M' \rangle$. Para obtener ρ hay que resolver la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho] \quad (8.5)$$

con $H = H_A - \mathbf{d} \cdot \mathbf{E}$ donde H_A es el hamiltoniano atómico. El segundo término describe la interacción entre la radiación y el medio en la aproximación dipolar. Para una transición dipolar entre los niveles J y J' , el producto del dipolo y el campo eléctrico viene dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{d} \cdot \mathbf{E} &= \sum_{M,q} \langle J'M + q | d_q | JM \rangle \\ &[|JM\rangle \langle J'M + q| E_q + (-1)^q |J'M + q\rangle \langle JM| E_{-q}] \quad (8.6) \end{aligned}$$

Introduciendo este valor en el Hamiltoniano, se pueden calcular los diferentes elementos de matriz de la matriz densidad. Por ejemplo, particularizando para la polarización σ_+ , se obtienen las siguientes ecuaciones para las coherencias:

$$\frac{d}{dt} \rho_{J'M, JM} = i\omega_A \rho_{J'M, JM} + \quad (8.7)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{i\tilde{E}}{\hbar} (\langle JM + 1 | d_1 | J'M \rangle \rho_{JM+1, JM} - \\ &- \langle JM | d_1 | J'M - 1 \rangle \rho_{J'M, J'M-1}) e^{i(\omega t - kz + \phi_+)} \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dt} \rho_{J'M-1, JM} = i\omega_A \rho_{J'M-1, JM} + \quad (8.8)$$

$$+ \frac{i\tilde{E}}{\hbar} \langle JM | d_1 | J'M - 1 \rangle (\rho_{JM, JM} - \rho_{JM, JM}) e^{i(\omega t - kz + \phi_+)}$$

$$\frac{d}{dt} \rho_{J'M+1, JM} = -i\omega_A \rho_{JM, J'M+1} + \quad (8.9)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{i\tilde{E}}{\hbar} (\langle JM | d_1 | J'M - 1 \rangle \rho_{J'M-1, J'M+1} - \\ &- \langle JM + 2 | d_1 | J'M + 1 \rangle \rho_{JM, JM+2}) e^{-i(\omega t - kz + \phi_+)} \end{aligned}$$

donde $\hbar\omega_A = \hbar\omega_J - \hbar\omega_{J'}$. Como las coherencias son inicialmente iguales a cero y las poblaciones distintas de cero, la única coherencia que puede tomar valores distintos de cero al evolucionar con el tiempo es $\rho_{J'M-1, JM}$. La evolución de las coherencias de tipo $\rho_{JM, JM'}$ y $\rho_{J'M, J'M'}$ (Zeeman) es de segundo orden y se desprecian. Definiendo

$$\hat{\rho}_{J'M-1, JM} = \rho_{J'M-1, JM} e^{-i(\omega t - kz + \phi_+)} \quad (8.10)$$

$$\delta_L = \omega - \omega_A \quad (8.11)$$

despreciando $\partial\phi_+/\partial t$ respecto a ω al derivar e incluyendo las tasas de decaimiento colisional de la coherencia Γ se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{\rho}_{J'M-1, JM} &= -(\Gamma + i\delta_L) \hat{\rho}_{J'M-1, JM} + \\ &+ \frac{i\tilde{E}}{\hbar} \langle JM | d_1 | J'M - 1 \rangle (n_{JM} - n_{J'M-1}) \end{aligned} \quad (8.12)$$

Suponiendo estado cuasi-estacionario ($(d/dt)\hat{\rho}_{J'M-1, JM} = 0$) y definiendo

$$\Psi(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma - i\delta_L}{\delta_L^2 + \Gamma^2} \quad (8.13)$$

se obtiene de la ecuación 8.4 el valor final de la polarización inducida por el campo σ_+ (e idénticamente para σ_-)

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\sigma_+} &= \frac{i\pi}{\hbar} \sum_M \langle JM|d_1|J'M-1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M-1}) \cdot \\ &\cdot \tilde{E} e^{i(\omega t - kz + \phi_+)} \mathbf{e}_1 + c.c. \end{aligned} \quad (8.14)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\sigma_-} &= \frac{i\pi}{\hbar} \sum_M \langle JM|d_{-1}|J'M+1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M+1}) \cdot \\ &\cdot \tilde{E} e^{-i(\omega t - kz + \phi_-)} \mathbf{e}_1 + c.c. \end{aligned} \quad (8.15)$$

Se puede demostrar (ver [93]) que

$$\begin{aligned} \sum_M \langle JM|d_{-1}|J'M+1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M+1}) &= \\ \sum_M \langle JM|d_1|J'M-1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M-1}) \end{aligned} \quad (8.16)$$

Llamando a esta cantidad $U_{JJ'}$ e introduciendo los valores de $E_{\sigma\pm}$, $P_{\sigma\pm}$ en la ecuación 8.1 se obtienen las siguientes ecuaciones

$$\left[\frac{\partial \phi}{\partial z} - \frac{\omega_p^2}{2kc^2} \right] \tilde{E} - i \frac{\partial \tilde{E}}{\partial z} = -\frac{ikU_{JJ'}}{2\epsilon_0 \hbar} \pi \Psi(\omega) \tilde{E} \quad (8.17)$$

$$\left[\frac{\partial \phi}{\partial z} - \frac{\omega_p^2}{2kc^2} \right] \tilde{E} + i \frac{\partial \tilde{E}}{\partial z} = \frac{ikU_{JJ'}}{2\epsilon_0 \hbar} \pi \Psi^*(\omega) \tilde{E} \quad (8.18)$$

para σ_+ y σ_- respectivamente. Tomando la parte real de cualquiera de las ecuaciones e integrándola (asumiendo que $U_{JJ'}$ es independiente de z (es decir, por debajo del régimen de saturación) se obtiene

$$\phi(z) = \phi + \left[\frac{\omega_p^2}{2kc^2} - \frac{kU_{JJ'}}{4\epsilon_0 \hbar} \chi(\omega) \right] z \quad (8.19)$$

donde $\chi(\omega) = i\pi [\Psi(\omega) - \Psi^*(\omega)] = \frac{2\delta_L}{\delta_L^2 + \Gamma^2}$. Introduciendo la dependencia con z de la fase en el número de onda k'

$$k' = k - \frac{\omega_p^2}{2kc^2} + \frac{kU_{JJ'}}{4\epsilon_0 \hbar} \chi(\omega) \quad (8.20)$$

se obtiene el índice de refracción $n(\omega) = k'/k$, es decir

$$n(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} + \frac{U_{JJ'}}{4\epsilon_0\hbar}\chi(\omega) \quad (8.21)$$

Si se particulariza en el centro de la línea ($\chi(\omega_A) = 0$) se obtiene el valor dado por la fórmula 2.37.

La ganancia se puede obtener de la parte imaginaria de cualquiera de las ecuaciones 8.17, 8.18, que en términos de la frecuencia se escribe como

$$\frac{\partial \tilde{E}(\nu, z)}{\partial z} = \frac{kU_{JJ'}}{4\epsilon_0\hbar}\Phi(\nu)\tilde{E}(\nu, z) \quad (8.22)$$

donde $\Phi(\nu)$ es el perfil normalizado de la línea (consultar [93] para ver su relación con $\Psi(\omega)$). Trabajando con intensidades, esta ecuación puede escribirse como

$$\frac{\partial I(\nu, z)}{\partial z} = G(\nu)I(\nu, z) \quad (8.23)$$

donde

$$G(\nu) = \frac{k}{2\epsilon_0}\Phi(\nu) \sum_M \langle JM|d_1|J'M-1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M-1}) \quad (8.24)$$

Las poblaciones, al igual que las coherencias, se calculan mediante la ecuación de Schrödinger 8.5, resultando

$$\begin{aligned} \frac{dn_{JM}}{dt} &= r_{JM} - \Gamma_{JM}n_{JM} - \\ &- \left[\langle JM|d_1|J'M-1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M-1}) + \right. \\ &+ \left. \langle JM|d_{-1}|J'M+1 \rangle^2 (n_{JM} - n_{J'M+1}) \right] \frac{E^2(\nu)\Phi(\nu)}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (8.25)$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_{J'M}}{dt} &= r_{J'M} - \Gamma_{J'M}n_{J'M} - \\ &- \left[\langle JM+1|d_1|J'M \rangle^2 (n_{JM+1} - n_{J'M}) + \right. \\ &+ \left. \langle JM-1|d_{-1}|J'M \rangle^2 (n_{JM-1} - n_{J'M}) \right] \frac{E^2(\nu)\Phi(\nu)}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (8.26)$$

En estas ecuaciones los coeficientes r y Γ representan respectivamente los procesos de población y vaciado de los respectivos niveles de energía, exceptuando los procesos de absorción y emisión estimulada asociados a la transición J-J' estudiada.

Con estas dos últimas ecuaciones, se ha cerrado el sistema: el cálculo del campo eléctrico mediante la ecuación 8.1 necesita conocer la polarización, dada por las ecuaciones 8.14 y 8.15. Éstas, a su vez, requieren el conocimiento de las poblaciones, dadas por las fórmulas 8.25 y 8.26 acopladas con la ecuación del campo eléctrico. Estas fórmulas representan el sistema de ecuaciones de Maxwell-Bloch.

Mediante este formalismo, se puede estudiar la polarización del haz amplificado (ecuaciones 8.2 y 8.3), la coherencia y efectos de difracción del haz ya que calculamos el campo eléctrico y no su cuadrado (intensidad) y el efecto de la variación temporal de las poblaciones atómicas en el proceso de amplificación. En concreto, a este último efecto se le dedicará la siguiente sección en la que se expondrá cómo, mediante este formalismo, se puede estudiar como optimizar la duración temporal de la ganancia (es decir, de la inversión de población) y la duración del haz de armónicos a amplificar para obtener pulsos con energías inalcanzables en la actualidad mediante el método de inyección de armónicos.

8.3. *Chirped Pulse Amplification*

En esta tesis se ha expuesto que la energía del haz obtenido mediante el esquema de inyección de armónicos en plasmas amplificadores está fuertemente limitada debido a los efectos de expansión y de refracción bidimensionales del plasma. Esto explica las energías obtenidas en diversos experimentos [106, 39], entre 10-90 nJ y marcadamente inferiores a las obtenidas anteriormente en amplificadores OFI [110]. Se ha demostrado que, una posible solución consiste en realizar plasmas más anchos que en la actualidad, reduciendo su longitud, pudiendo obtener energías cercanas a los 200 μJ con láseres de bombeo relativamente compactos (energías del orden de 50 J).

Cabe la posibilidad de preguntarse cómo se podría mejorar este esquema y las propiedades del haz amplificado si se dispone de suficiente energía. Se ha explicado que los plasmas amplificadores no pueden ensancharse indefinidamente, ya que a partir de cierta anchura y ganancia, se producirá emisión láser transversal, reduciendo la inversión de población y la energía en el haz a amplificar. Así pues, una vez optimizado el acoplamiento espacial es necesario estudiar el acoplamiento temporal entre el haz a amplificar y la duración de la ganancia en el plasma. Un ejemplo de estos efectos se encuentra en el estudio de los láseres de rayos X basados en plasma. Los láseres basados en el esquema transitorio TCE obtienen energías del orden de 4 μJ , mientras que el esquema cuasi-estacionario QSS permite obtener hasta 12 mJ de energía en el haz. Este efecto tiene su origen principalmente en la diferencia

de la relación existente entre la duración de la ganancia en el plasma y la duración de un tren de impulsión. En el esquema QSS se amplifican un gran número de trenes de impulsión ya que, aunque baste con unos pocos para alcanzar la saturación, los niveles superiores se vuelven a poblar rápidamente entre el paso de unos pocos trenes de impulsión. En el esquema transitorio las condiciones de ganancia sólo se mantienen el tiempo suficiente como para que se amplifiquen unos pocos trenes de impulsión [36]. Sería deseable poder realizar un efecto parecido en el esquema de inyección de armónicos, de tal manera que se pueda obtener una mayor energía manteniendo la coherencia, frente de onda y polarización del haz.

Inyectar un haz de armónicos de alto orden equivaldría, aproximadamente, a un tren de impulsión. Al atravesar el plasma, en esquema transitorio, parte de la energía no se extrae y continúa almacenada. Esta energía que no se ha extraído es muy superior en el esquema QSS (si se deja evolucionar al sistema, la energía acabaría escapando del amplificador gracias a la Amplificación de la Emisión Estimulada, produciendo un haz incoherente y sin polarizar). La energía del haz ASE se pierde ya que la duración del haz de armónicos es muy inferior a la duración de la ganancia en el amplificador. Esto puede evitarse, pudiendo obtener haces ultra-intensos, haciendo uso de la técnica conocida como *Chirped Pulse Amplification* (CPA). Mediante esta técnica se puede extender la duración temporal del pulso de armónicos de tal manera que coincida con la duración de la ganancia en el plasma, extrayendo toda la energía disponible y, una vez amplificado, volver a comprimir el pulso para obtener pulsos de una gran intensidad. Se pueden realizar unas estimaciones simples para comprender las ventajas de este método. En el caso de plasmas transitorios, el tiempo de recuperación de la ganancia (es decir, el tiempo necesario para recuperar la inversión de población una vez que ha sido vaciada por la amplificación de un tren de impulsión) es del orden de 200 fs mientras que la duración de las condiciones de producción de ganancia en el plasma es del orden de 5 ps. Esto da como resultado que se podrían amplificar 25 trenes de impulsión o, en el caso del CPA, que la energía obtenida al hacer coincidir la duración del haz de armónicos con la duración de la ganancia sería 25 veces superior. La posterior compresión del haz tendría un rendimiento de aproximadamente el 50 % por lo que se obtendría 12 veces más energía y en un pulso muy corto.

En el caso de utilizar el esquema QSS, la duración de la ganancia es de 200 ps, por lo que la energía podría ser hasta 1000 veces superior. Comprimiendo con el mismo rendimiento el haz resultante tendría una energía 500 veces superior, por lo que, aplicando esta técnica al esquema propuesto en esta tesis se podrían alcanzar hasta 100 mJ con una duración de 100 fs, pudiendo obtener intensidades superiores a 10^{20} W/cm^2 .

8.4. Conclusiones

En este capítulo se han explicado las limitaciones que tienen los trabajos realizados en esta tesis, en concreto en el estudio de las propiedades ópticas del haz amplificado (coherencia, frente de onda, polarización) y en la optimización del acoplamiento temporal entre el plasma amplificador y el haz de armónicos a inyectar. El estudio de estos fenómenos se puede realizar mediante el formalismo de Maxwell-Bloch. El sistema de ecuaciones resultante y su relación con esta tesis se ha expuesto, dejando su resolución como proyecto para el futuro. Así mismo se ha indicado una aplicación que podría ser estudiada mediante este formalismo: la técnica de *Chirped Pulse Amplification*. Debido a que la duración de la ganancia es muy superior a la duración de un pulso de armónicos, sería posible extraer mucha más energía del plasma si este pulso se *estirara* temporalmente. Una vez amplificado, podría volver a comprimirse para obtener un haz ultra-intenso. Aplicando esta técnica a los plasmas optimizados en esta tesis se podrían obtener hasta 100 mJ en 100 fs que, focalizados al límite de difracción permitirían obtener intensidades superiores a 10^{20} W/cm^2 .

Capítulo 9

Conclusiones

El desarrollo de fuentes de radiación X coherente es un tema de gran actualidad, debido a las prometedoras aplicaciones en diversos campos como la biología [60, 16], la física [41, 19] e incluso procesos industriales como la litografía.

En la actualidad existen diversas fuentes disponibles para aplicaciones, tanto fuentes basadas en la amplificación de la emisión espontánea en plasmas, como basadas en armónicos de alto orden o bien los láseres de electrones libres. Sin embargo, muchas aplicaciones de gran interés requieren haces muy brillantes, energéticos y focalizables. Los láseres de electrones libres permiten obtener, de manera sencilla para el usuario, haces con las propiedades requeridas. Sin embargo, estas instalaciones son muy costosas (dos ejemplos en la actualidad son FLASH [7] y LCLS [1]) por lo que sería deseable desarrollar fuentes con las mismas propiedades pero con menores costes.

La inyección de armónicos en plasmas amplificadores permite obtener haces focalizables, polarizados, de corta duración (centenas de femtosegundos) y, se prevee que de alta energía [110]. A pesar de estos resultados prometedores, es necesario un estudio en profundidad de estos amplificadores que pueda explicar los resultados obtenidos en la inyección de plasmas densos [106], donde se obtuvo menos energía de la que cabría esperar.

En esta tesis se ha realizado un estudio computacional de estos plasmas, explicando los resultados experimentales. Para ello ha sido necesario realizar mejoras en el código usado. Estos avances serán resumidos en la siguiente sección.

9.1. Resultados de la tesis

En esta tesis se ha usado el código bidimensional con transporte de radiación en AMR, ARWEN, para el estudio de los plasmas amplificadores de radiación X blanda. La tesis ha constado de una parte consistente en el desarrollo del código, de cara a su adaptación al problema tratado y de una segunda parte consistente en el estudio computacional de estos amplificadores, en concreto, en el estudio del impacto de la rugosidad y diversas imperfecciones del haz láser en el amplificador y en la optimización del ancho del plasma. Así mismo, se han realizado estudios preeliminares de la amplificación de haces de armónicos de alto orden en el plasma optimizado previamente. Los resultados obtenidos son:

- Dentro del trabajo de desarrollo, se ha añadido la capacidad de cálculo hidrodinámico en dos temperaturas (electrónica e iónica), al introducir las subrutinas programadas por M. González basándose en un modelo realizado por P. Velarde [101]. Así mismo, se ha programado una subrutina de trazado de rayos para tener en cuenta los efectos de refracción en la deposición de la energía del láser. Se ha paralelizado el paquete de conducción electrónica al introducir la librería HIPS [27] de resolución de sistemas lineales. Finalmente, se han programado subrutinas para estandarizar la salida del código, usando el formato HDF [3], facilitando el postproceso de estos datos y su acoplamiento con otros códigos como SHADOX [56].
- Se ha continuado el trabajo de modelado computacional comenzado en [14, 12], estudiando la influencia de la longitud transversal del haz láser en la evolución del plasma. Se ha logrado simular con muy buen acuerdo el experimento de inyección en plasmas densos [106] y se ha demostrado que la energía extraída es inferior al valor esperado debido a la expansión lateral del plasma. Se ha propuesto un esquema que permitiría evitar estos efectos obteniendo energías de centenas de microJulios.
- Se ha estudiado el acoplamiento espectral del haz de armónicos inyectado con la línea amplificadora en el plasma. Para ello se ha modelado la amplificación de los armónicos en los plasmas previamente optimizados. Se ha identificado este acoplamiento como un problema fundamental de cara a la obtención de haces energéticos y con buenas propiedades y se ha propuesto el uso de varias etapas amplificadoras para solucionar el problema.

- Se ha estudiado la influencia que las imperfecciones, tanto en el blanco como en el perfil láser, tienen en la evolución del plasma, en la generación de ganancia y en la amplificación del haz. Se ha demostrado que la rugosidad del blanco tiene un impacto fundamental, de acuerdo con lo reportado en [98]. Simulaciones de amplificación del haz con el código SHADOX confirman este hecho. Así mismo, se ha demostrado que es necesario que el láser que genera el plasma sea suficientemente homogéneo, aunque su impacto es menor que el de la rugosidad. El pulso corto influye en el plasma durante unos pocos picosegundos y sólo en la temperatura electrónica, reduciéndose rápidamente la inhomogeneidad gracias a los procesos difusivos por lo que su impacto en la ganancia es mínimo.

Estos han sido los principales desarrollos de la tesis, que han sido objeto de diversas publicaciones y presentaciones en congresos [65, 68, 69, 66, 67, 70].

9.2. Desarrollos futuros

Como se ha explicado anteriormente, las propiedades ópticas del haz (coherencia, polarización, focalización) así como la energía tienen una importancia fundamental en las aplicaciones. Es pues necesario un estudio exhaustivo del proceso de amplificación al atravesar la columna del plasma. En esta tesis se han realizado asunciones conservadoras y modelos unidimensionales basados en la ganancia de pequeña señal y la energía de saturación. Estos modelos nos han permitido identificar los problemas fundamentales en los distintos amplificadores y optimizar la forma del amplificador. Sin embargo, sería deseable realizar un estudio completo tridimensional de la amplificación con el código SHADOX, de cara a optimizar los diferentes parámetros de la inyección (energía, focalización, ángulo de entrada).

Así mismo, la coherencia y polarización del haz, así como fenómenos ligados a la variación temporal de las poblaciones que dan lugar a la ganancia, se pueden estudiar mediante el formalismo de Bloch-Maxwell. Este formalismo se ha introducido en el capítulo 8 y permite estudiar la evolución del campo eléctrico y las poblaciones de los distintos niveles atómicos. El estudio del proceso de amplificación mediante la resolución de estas ecuaciones ayudará a la mejor comprensión de los efectos de la amplificación en la coherencia del haz y permitirá el diseño de nuevas técnicas que permitan conseguir pulsos de radiación X blanda ultraintensos, como puede ser el CPA (*Chirped Pulse Amplification*).

Conclusions

Le développement des sources de rayonnement X cohérente présente un très grand intérêt en raison de leurs applications en biologie [60, 16], physique [41, 19] ou dans l'industrie, pour la lithographie par exemple. Il existe actuellement diverses sources disponibles pour les applications, celles ci sont basées soit sur l'émission spontanée de rayonnement par les plasmas, soit sur les harmoniques d'ordre élevé ou enfin sur les FEL. Cependant, les applications les plus intéressantes requièrent des faisceaux brillants, avec une relativement haute énergie et un bon front d'onde. Les FEL permettent d'obtenir, d'une manière simple pour l'utilisateur, des faisceaux avec les propriétés requises. Toutefois, ces installations sont très coûteuses (comme FLASH [7] et LCLS [1]) et il serait souhaitable de développer des sources plus compactes et moins coûteuses.

L'injection d'harmoniques dans des plasmas amplificateurs permet de obtenir des faisceaux focalisables, polarisés, de durée très courte (quelques centaines de femtosecondes) et ayant une énergie élevée [110]. Malgré tous ces résultats, il est nécessaire d'étudier en profondeur ces amplificateurs pour expliquer les expériences avec injection dans des plasmas denses [106], où l'énergie obtenue se révèle inférieure à celle attendue.

Dans cette thèse nous avons fait une étude numérique de ces amplificateurs qui permet d'expliquer les résultats expérimentaux. Pour ce faire, nous avons amélioré le code numérique utilisé. Ces améliorations seront décrites dans la section suivante.

Résultats de la thèse

Dans cette thèse nous avons utilisé le code bidimensionnel en AMR avec transport du rayonnement ARWEN, pour l'étude des plasmas amplificateurs de rayonnement X. Cette thèse est divisée en deux parties: développement du code ARWEN, pour l'adapter au problème traité, puis étude numérique des amplificateurs. Dans cette dernière partie nous étudions concrètement l'impact que la rugosité ainsi que d'autres défauts du faisceau laser ont sur

l'amplificateur et nous tachons aussi d'optimiser la longueur du plasma. De même, nous effectuons une étude préliminaire sur l'amplification des faisceaux d'harmoniques d'ordre élevé à travers le plasma.

Les résultats obtenus sont :

- L'ajout de divers modules dans le code pour prendre en considération les deux fluides électronique et ionique [101] ainsi que les effets de réfraction lors de la dépôt de l'énergie du laser dans le plasma. Le module de conduction thermique a été parallélisé en ajoutant la librairie HIPS [27] et la sortie de données a été standardisée avec la librairie HDF [3], ce qui nous a permis de post-processer la sortie d'ARWEN avec le code SHADOX [56].
- Nous avons continué les travaux déjà commencés [14, 12], en étudiant l'influence de la longueur du faisceau laser sur l'évolution hydrodynamique du plasma. Nous avons modélisé, avec un très grand accord, l'expérience d'injection d'harmoniques d'ordre élevé dans des plasmas denses [106] et nous avons démontré que l'expansion latérale du plasma réduit l'énergie extraite. Nous avons proposé un amplificateur qui, en évitant ces effets, permettra d'obtenir des énergies de quelques centaines de microJoules.
- Nous avons étudié le couplage spectral entre le faisceau d'harmoniques injecté et la ligne amplificatrice du plasma. La différence de longueur de ligne a été identifiée comme un problème très important. L'utilisation de plusieurs amplificateurs est une solution possible à ce problème.
- Nous avons étudié l'influence qu'ont les imperfections de la cible et du faisceau laser sur l'évolution du plasma, la création du gain et l'amplification du faisceau harmonique. Nous avons montré que la rugosité de la cible a une très grande influence et ceci avec un bon accord avec les expériences [98]. Les simulations faites avec le code SHADOX confirment ce fait. Nous avons également montré que le faisceau laser chargé de créer et chauffer le plasma doit être de bonne qualité, mais que l'influence du faisceau sur le plasma est moins critique que celle de la rugosité. Les imperfections du laser court, chargé de chauffer les électrons, n'ont pas d'influence importante sur le plasma, en raison de sa brièveté.

Les résultats de cette thèse ont été publiés et présentés dans plusieurs congrès [65, 68, 69, 66, 67, 70].

Travaux futures

Les propriétés optiques des faisceaux amplifiés (cohérence, polarisation, front d'onde) et leur énergie ont une importance fondamentale pour les applications les plus intéressantes. Il faut donc étudier en profondeur le processus d'amplification à travers la colonne de plasma. Dans cette thèse nous avons fait quelques hypothèses et des modèles unidimensionnels qui nous ont permis d'identifier les problèmes fondamentaux et optimiser le plasma. Cependant, il serait souhaitable de faire une étude tridimensionnelle du processus d'amplification avec le code SHADOX, dans le but d'optimiser les paramètres d'injection.

Il faut également citer la cohérence et la polarisation du faisceau ainsi que tous les phénomènes liés à la variation temporelle des populations, qui créent l'inversion de population, et peuvent être étudiés avec les équations de Bloch-Maxwell, introduites dans le chapitre 8. Ces équations permettent d'étudier l'évolution du champ électrique et des populations des niveaux atomiques. Une meilleure compréhension du processus d'amplification aidera au développement des nouvelles techniques, comme le CPA (*Chirped Pulse Amplification*), qui permettront enfin d'obtenir des faisceaux ultra-intenses de rayonnement X.

Bibliografía

- [1] <http://lcls.slac.stanford.edu/>.
- [2] Metis library. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>.
- [3] *HDF 4.2r4 Reference Manual*, 2009.
- [4] *HDF 4.2r4 User's Guide*, 2009.
- [5] I. R. Al'miev, O. Larroche, D. Benredjem, J. Dubau, S. Kazamias, C. Möller, and A. Klisnick. Dynamical description of transient x-ray lasers seeded with high-order harmonic radiation through maxwell-bloch numerical simulations. *Phys. Rev. Lett.*, 99(12):123902, Sep 2007.
- [6] Stefano Atzeni and Jürgen Meyer-Ter-Vehn. *The Physics of Inertial Fusion*. Clarendon Pres-Oxford, 2004.
- [7] V. Ayvazyan, N. Baboi, J. Bähr, V. Balandin, B. Beutner, A. Brandt, I. Bohnet, A. Bolzmann, R. Brinkmann, O.I. Brovko, J.P. Carneiro, S. Casalbuoni, M. Castellano, P. Castro, L. Catani, E. Chiadroni, S. Choroba, A. Cianchi, H. Delsim-Hashemi, G. Di Pirro, M. Dohlus, S. Düsterer, H.T. Edwards, B. Faatz, A.A. Fateev, J. Feldhaus, K. Flöttmann, J. Frisch, L. Fröhlich, T. Garvey, U. Gensch, N. Golubeva, H.-J. Grabosch, B. Grigoryan, O. Grimm, U. Hahn, J.H. Han, M.V. Hartrott, K. Honkavaara, M. Hüning, R. Ischebeck, E. Jaeschke, M. Jablonka, R. Kammering, V. Katalev, B. Keitel, S. Khodyachykh, Y. Kim, V. Kocharyan, M. Körfer, M. Kollwe, D. Kostin, D. Krämer, M. Krassilnikov, G. Kube, L. Lilje, T. Limberg, D. Lipka, F. Löh, M. Luong, C. Magne, J. Menzel, P. Michelato, V. Miltchev, M. Minty, W.D. Möller, L. Monaco, W. Müller, M. Nagl, O. Napoly, P. Nicolosi, D. Nölle, T. Nu nez, A. Oppelt, C. Pagani, R. Paparella, B. Petersen, B. Petrosyan, J. Pflüger, P. Piot, E. Plönjes, L. Poletto, D. Proch, D. Pugachov, K. Rehlich, D. Richter, S. Riemann, M. Ross, J. Rossbach, M. Sachwitz, E.L. Saldin, W. Sandner, H. Schlarb, B. Schmidt,

- M. Schmitz, P. Schmüser, J.R. Schneider, E.A. Schneidmiller, H.-J. Schreiber, S. Schreiber, A.V. Shabunov, D. Sertore, S. Setzer, S. Simrock, E. Sombrowski, L. Staykov, B. Steffen, F. Stephan, F. Stulle, K.P. Sytchev, H. Thom, K. Tiedtke, M. Tischer, R. Treusch, D. Trines, I. Tsakov, A. Vardanyan, R. Wanzenberg, T. Weiland, H. Weise, M. Wendt, I. Will, A. Winter, K. Wittenburg, M.V. Yurkov, I. Zagorodnov, P. Zambolin, and K. Zapfe. First operation of a free-electron laser generating gw power radiation at 32 nm wavelength. *Eur. Phys. J. D*, 37(2):297–303, feb 2006.
- [8] M. J. Berger and P. Colella. Local adaptive mesh refinement for shock hydrodynamics. *J. Comp. Phys.*, 82:64–84, 1989.
- [9] R. E. Burge, M. T. Browne, P. Charalambous, G. E. Slark, and P. J. Smith. Suboptical x-ray imaging using the vulcan x-ray laser. *Opt. Lett.*, 18:661–663, 1993.
- [10] A. Carillon, H. Z. Chen, P. Dhez, L. Dwivedi, J. Jacoby, P. Jaegle, G. Jamelot, Jie Zhang, M. H. Key, A. Kidd, A. Klisnick, R. Kodama, J. Krishnan, C. L. S. Lewis, D. Neely, P. Norreys, D. O’Neill, G. J. Pert, S. A. Ramsden, J. P. Raucourt, G. J. Tallents, and J. Uhomobhi. Saturated and near-diffraction-limited operation of an xuv laser at 23.6 nm. *Phys. Rev. Lett.*, 68(19):2917–2920, May 1992.
- [11] A. Carillon, P. Jaegle, and P. Dhez. Extreme-ultraviolet continuum absorption by a laser-generated aluminum plasma. *Phys. Rev. Lett.*, 25(3):140–143, Jul 1970.
- [12] K. Cassou. *Études d’amplificateurs plasma-laser à haute cadence dans le domaine X-UV*. PhD thesis, 2006.
- [13] K. Cassou, S. Kazamias, D. Ros, F. Plé, G. Jamelot, A. Klisnick, O. Lundh, F. Lindau, A. Persson, C.-G. Wahlström, S. de Rossi, D. Joyeux, B. Zielbauer, D. Ursescu, and T. Kühl. Optimization toward a high-average-brightness soft-x-ray laser pumped at grazing incidence. *Opt. Lett.*, 32(2):139–141, 2007.
- [14] K. Cassou, Ph. Zeitoun, P. Velarde, F. Roy, F. Ogando, M. Fajardo, G. Faivre, and D. Ros. Transverse spatial improvement of a transiently pumped soft-x-ray amplifier. *Phys. Rev. A*, 74:045802, 2006.
- [15] H. N. Chapman. X-ray imaging beyond the limits. *Nature Materials*, 8:299–301, 2009.

- [16] H. N. Chapman, A. Barty, M. J. Bogan, S. Boutet, M. Frank, S. P. Han-Riege, S. Marchesini, B. W. Woods, S. Bajt, W. H. Benner, R. A. London, E. Plönjes, M. Kuhlmann, R. Treusch, S. Düsterer, T. Tschentscher, J. R. Schneider, E. Spiller, T. Möller, C. Bostedt, M. Hoenner, d. A. Shapiro, K. O. Hodgson, D. van der Spoel, F. Burmeister, M. Bergh, C. Caleman, G. Huldt, M. M. Seibert, F. R. N. C. Maia, R. W. Lee, A. Szöke, N. Timneanu, and J. Hajdu. Femtosecond diffractive imaging with a soft-x-ray free-electron laser. *Nature Physics*, 2:839–843, 2006.
- [17] Phillip Colella and Paul R. Woodward. The piecewise parabolic method (ppm) for gas-dynamical simulations. *Journal of Computational Physics*, 54(1):174 – 201, 1984.
- [18] P. B. Corkum. Plasma perspective on strong-field multiphoton ionization. *Phys. Rev. Lett.*, 71:1994, 1993.
- [19] P. B. Corkum and f. Krausz. Attosecond science. *Nature physics*, 3:381, 2007.
- [20] H. Daido, S. Ninomiya, T. Imani, R. Kodama, M. Takagi, Y. Kato, K. Murai, J. Zhang, Y. You, and Y. Gu. Nickellike soft-x-ray lasing at the wavelengths between 14 and 7.9 nm. *Opt. Lett.*, 21(13):958–960, 1996.
- [21] T. Ditmire, M. H. R. Hutchinson, M. H. Key, C. L. S. Lewis, A. MacPhee, I. Mercer, D. Neely, M. D. Perry, R. A. Smith, J. S. Wark, and M. Zepf. Amplification of xuv harmonic radiation in a gallium amplifier. *Phys. Rev. A*, 51:R4337, 1995.
- [22] B. Dromey, M. Zepf, A. Gopal, K. Lancaster, M. S. Wei, K. Krushelnick, M. Tatarakis, N. Vakis, S. Moustakizis, R. Kodama, M. Tampo, C. Stoeckl, R. Clarke, H. Habara, D. Neely, S. Karsch, and P. Norreys. High harmonic generation in the relativistic limit. *Nature physics*, 2:456, 2006.
- [23] Albert Einstein. *Phys. Zs.*, (18):121, 1917.
- [24] K. Mima *et al.* *Laser Plasma Theory and Simulation*. Harwood Academic Publishers, 1994.
- [25] Ch. L. Fefferman. Existence and smoothness of the navier-stokes equation.

- [26] Center for Computational Science and Engineering, 2009.
- [27] J. Gaidamour, P. Hénon, and Y. Saad. Hips user's guide.
- [28] C. Garcia. PhD thesis, 2010.
- [29] C. F. Gerald and P. O. Wheatley. *Análisis numérico con aplicaciones, 6ª edición*. Pearson Educación, 2000.
- [30] J. Ph. Goddet, S. Sebban, J. Gautier, Ph. Zeitoun, C. Valentin, F. Tissandier, T. Marchenko, G. Lambert, M. Ribières, D. Douillet, T. Lefrou, G. Iaquaniello, F. Burgy, G. Maynard, B. Cros, B. Robillard, T. Mocek, J. Nejd, M. Kozlova, and K. Jakubczak. Aberration-free laser beam in the soft x-ray range. *Opt. Lett.*, 34(16):2438–2440, 2009.
- [31] W. H. Goldstein, B. L. Whitten, A. U. Hazi, and M. H. Chen. Mechanisms for creating population inversions in ne-like ions. *Phys. Rev. A*, 36:3607, 1987.
- [32] M. Gonzalez, C. García-Fernández, and P. Velarde. 2d numerical comparison between s_n and m_1 radiation transport methods. *Annals of Nuclear Energy*, 36:886–895, 2009.
- [33] M. González. *Contribution à l'étude numérique de l'hydrodynamique radiative: des expériences de chocs radiatifs aux jets astrophysiques*. PhD thesis, 2006.
- [34] J. W. Goodman. *Introducción a la Óptica de Fourier*. U.N.E.D., 2008.
- [35] S. Gordienko, A. Pukhov, O. Shorokhov, and T. Baeva. Relativistic doppler effect: Universal spectra and zeptosecond pulses. *Phys. Rev. Lett.*, 93(11):115002, Sep 2004.
- [36] O. Guilbaud, A. Klisnick, D. Joyeux, D. Benredjem, K. Cassou, S. Kazamias, D. Ros, D. Phalippou, G. Jamelot, and C. Möller. Longitudinal coherence and spectral profile of a nickel-like silver transient soft x-ray laser. *Eur. Phys. Jour. D*, 2006.
- [37] Daido H. Review of soft x-ray laser researches and developments. *Reports on Progress in Physics*, 65:1513–1576(64), 2002.
- [38] P. L. Hagelstein. *Physics of short wavelength laser design*. PhD thesis, 1981.

- [39] N. Hasegawa, T. Kawachi, A. Sasaki, M. Kishimoto, K. Sukegawa, M. Tanaka, R. Z. Tai, Y. Ochi, M. Nishikino, K. Nagashima, and Y. Kato. Direct measurement of the temporal profile of the amplification gain of the transient collisional excitation neonlike manganese x-ray laser medium. *Phys. Rev. A*, 76:043805, 2007.
- [40] Jeff Hecht. The history of the x-ray laser. *Optics and Photonics News*.
- [41] J. Itatani, J. Levesque, D. Zeidler, H. Niikura, H. Pépin, J. C. Kieffer, P. B. Corkum, and D. M. Villeneuve. Tomographic imaging of molecular orbitals. *Nature*, 432:867–871, 2004.
- [42] P. Jaeglé. *Coherent Sources of XUV Radiation*. Springer, 2006.
- [43] P. Jaegle, A. Carillon, P. Dhez, G. Jamelot, A. Sureau, and M. Cukier. Experimental evidence for the possible existence of a stimulated emission in the extreme uv range. *Physics Letters A*, 36(3):167 – 168, 1971.
- [44] Pierre Jaeglé, Gérard Jamelot, Antoine Carillon, Annie Klisnick, Alain Sureau, and Hélène Guennou. Soft-x-ray amplification by lithiumlike ions in recombining hot plasmas. *J. Opt. Soc. Am. B*, 4(4):563–574, 1987.
- [45] J. Dunn, Y. Li, A. L. Osterheld, J. Nilsen, J. R. Hunter, and V. N. Shlyaptsev. Gain saturation regime for laser-driven tabletop, transient ni-like ion x-ray lasers. *Phys. Rev. Lett.*, 84:4834, 2000.
- [46] R. Keenan, J. Dunn, P. K. Patel, D. F. Price, R. F. Smith, and V. N. Shlyaptsev. High-repetition-rate grazing-incidence pumped x-ray laser operating at 18.9 nm. *Phys. Rev. Lett.*, 94:103901, 2005.
- [47] Chul Min Kim, Karol A. Janulewicz, Hyung Taek Kim, and Jongmin Lee. Amplification of a high-order harmonic pulse in an active medium of a plasma-based x-ray laser. *Phys. Rev. A*, 80:053811, 2009.
- [48] Chul Min Kim, Jongmin Lee, and Karol A. Janulewicz. Coherent amplification of an ultrashort pulse in a high- and swept-gain medium with level degeneracy. *Phys. Rev. Lett.*, 104:053901, 2010.
- [49] Ch. Kittel. *Introducción a la física del estado sólido*. Reverté, 2003.
- [50] Jeffrey A. Koch, Brian J. MacGowan, Luiz B. Da Silva, Dennis L. Matthews, James H. Underwood, Philip J. Batson, Richard W. Lee,

- Richard A. London, and Stan Mrowka. Experimental and theoretical investigation of neonlike selenium x-ray laser spectral linewidths and their variation with amplification. *Phys. Rev. A*, 50(2):1877–1898, Aug 1994.
- [51] William L. Kruer. *The Physics of Laser Plasma Interactions*. Westview Press, 2003.
- [52] O. Larroche, D. Ros, A. Klisnick, A. Sureau, C. Möller, and H. Guenou. Maxwell-bloch modeling of x-ray-laser-signal buildup in single- and double-pass configurations. *Phys. Rev. A*, 62(4):043815, Sep 2000.
- [53] B. E. Lemoff, G. Y. Yin, C. L. Gordon III, C. P. J. Barty, and S. E. Harris. Demonstration of a 10-hz femtosecond-pulse-driven xuv laser at 41.8 nm in xe ix. *Phys. Rev. Lett.*, 74(9):1574–1577, Feb 1995.
- [54] Y. Li and G. P. Preztler. *Phys. Plasmas.*, 4(479), 1997.
- [55] F. Lindau, O. Lundh, A. Persson, K. Cassou, S. Kazamias, D. Ros, F. Plé, G. Jamelot, A. Klisnick, S. de Rossi, D. Joyeux, B. Zielbauer, D. Ursescu, T. Kühn, and C.-G. Wahlström. Quantitative study of 10 hz operation of a soft x-ray laser—energy stability and target considerations. *Opt. Express*, 15(15):9486–9493, 2007.
- [56] M. Marti and M. Fajardo. Status of shadox. Comunicación personal.
- [57] D. L. Matthews, P. L. Hagelstein, M. D. Rosen, M. J. Eckart, N. M. Ceglio, A. U. Hazi, H. Medeck, B. J. MacGowan, J. E. Trebes, B. L. Whitten, E. M. Campbell, C. W. Hatcher, A. M. Hawryluk, R. L. Kauffman, L. D. Pleasance, G. Rambach, J. H. Scofield, G. Stone, and T. A. Weaver. Demonstration of a soft x-ray amplifier. *Phys. Rev. Lett.*, 54(2):110–113, Jan 1985.
- [58] P. W. Milonni and J. H. Eberly. *Lasers*. John Wiley & Sons, 1988.
- [59] Yutaka Nagata, Katsumi Midorikawa, Shoich Kubodera, Minoru Obata, Hideo Tashiro, and Koichi Toyoda. Soft-x-ray amplification of the lyman- α transition by optical-field-induced ionization. *Phys. Rev. Lett.*, 71(23):3774–3777, Dec 1993.
- [60] Richard Neutze, Remco Wouts, David Van der Spoel, Edgar Weckert, and Janos Hajdu. Potential for biomolecular imaging with femtosecond x-ray pulses. *Nature*, 406(6797):752, 2000.

- [61] P. V. Nickles, V. N. Shlyaptsev, M. Kalachnikov, M. Schnürer, I. Will, and W. Sandner. Short pulse x-ray at 32.6 nm based on transient gain in ne-like titanium. *Phys. Rev. Lett.*, 78:2748, 1997.
- [62] F. Ogando. Análisis de ecuaciones de estado para fusión por confinamiento inercial, 1996. Proyecto fin de carrera de la E.T.S.I. Industriales (UPM).
- [63] F. Ogando. *Resolución Numérica de la Ecuación de Transporte de Radiación en Malla Adaptativa Refinada Multidimensional*. PhD thesis, 2004.
- [64] F. Ogando and P. Velarde. Development of a radiation transport fluid dynamic code under amr scheme. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 71:541, 2001.
- [65] E. Oliva, P. Zeitoun, M. Marti, P. Velarde, M. Fajardo, and K. Cassou. Study of the impact of small-scale plasma modulations and the size of the plasma on seeded soft x-ray laser homogeneity. *Journal of Physics: Conference Series*, 112(4):042066 (4pp), 2008.
- [66] E. Oliva, Ph. Zeitoun, M. Fajardo, P. Velarde, K. Cassou, D. Ros, and S. Sebban. Optimized soft x-ray amplifier by tailoring plasma hydrodynamics. volume 7451, page 74510Y. SPIE, 2009.
- [67] E. Oliva, Ph. Zeitoun, M. Fajardo, P. Velarde, K. Cassou, D. Ros, and S. Sebban. Optimization of soft x-ray amplifier by controlling plasma hydrodynamics. volume 1228. AIP Conference Proceedings, 2010.
- [68] E. Oliva, Ph. Zeitoun, S. Sebban, M. Fajardo, P. Velarde, K. Cassou, and D. Ros. Optimization of soft x-ray amplifier by tailoring plasma hydrodynamics. *Opt. Lett.*, 34(17):2640–2642, 2009.
- [69] E. Oliva, Ph. Zeitoun, S. Sebban, M. Fajardo, P. Velarde, K. Cassou, and D. Ros. Optimization of soft x-ray amplifier by tailoring plasma hydrodynamics. *Virtual Journal of Ultrafast Science*, 8(10), 2009.
- [70] E. Oliva, Ph. Zeitoun, S. Sebban, M. Fajardo, P. Velarde, K. Cassou, D. Ros, D. Portillo, and S. le Pape. An hydrodynamic study of plasma amplifiers for soft x-ray laser: Transition in hydrodynamic behaviours for plasma columns with widths ranging from 20 micrometer to 2 mm. 2010. Submitted for publication.

- [71] S. Le Pape and Ph. Zeitoun. Modeling of the influence of the driving laser wavelength on the beam quality of transiently pumped x-ray lasers. *Optics Communications*, 219(1-6):323 – 333, 2003.
- [72] R. Paschotta. *Field Guide to Lasers*. SPIE, 2008.
- [73] F. Pedaci, Y. Wang, M. Berrill, B. Luther, E. Granados, and J. J. Rocca. Highly coherent injection-seeded 13.2 nm tabletop soft x-ray laser. *Opt. Lett.*, 33(5):491–493, 2008.
- [74] F. Pellegrini. Pt-scotch and libscotch 5.1 user’s guide.
- [75] A. Perea, D. Rodríguez, and P. L. García. *Mecánica Cuántica II*. Universidad Nacional de Educación a Distancia, 2006.
- [76] G. J. Pert. *J. Fluid Mech.*, 131(401), 1983.
- [77] G J Pert. Refraction and absorption in plasma atmospheres. *Plasma Physics*, 25(4):387–419, 1983.
- [78] Gerald C. Pomraning. *The Equations of Radiation Hydrodynamics*. Dover, 1973.
- [79] H. Van Regemorter. Rate of collisional excitation in stellar atmospheres. *Astrophys. J.*, 136:906–915, 1962.
- [80] David H. Reitze, Sophie Kazamias, Frederick Weihe, Genevive Mullet, Denis Douillet, Frederika Aug, Olivier Albert, Vidya Ramanathan, Jean Paul Chambaret, Danile Hulin, and Philippe Balcou. Enhancement of high-order harmonic generation at tuned wavelengths through adaptive control. *Opt. Lett.*, 29(1):86–88, 2004.
- [81] C. A. Rendleman, V. E. Beckner, M. Lijewski, W. Crutchfield, and J. B. Bell. Parallelization of structured, hierarchical adaptive mesh refinement algorithms. *Comput. Visual Sci.*, 3:147–157, 2000.
- [82] J. J. Rocca, D. C. Beethe, and M. C. Marconi. Proposal for soft-x-ray and xuv lasers in capillary discharges. *Opt. Lett.*, 13(7):565–567, 1988.
- [83] J. J. Rocca, D. P. Clark, J. L. A. Chilla, and V. N. Shlyaptsev. Energy extraction and achievement of the saturation limit in a discharge-pumped table-top soft x-ray amplifier. *Phys. Rev. Lett.*, 77(8):1476–1479, Aug 1996.

- [84] J. J. Rocca, O. D. Cortázar, B. Szapiro, K. Floyd, and F. G. Tomasel. Fast-discharge excitation of hot capillary plasmas for soft-x-ray amplifiers. *Phys. Rev. E*, 47(2):1299–1304, Feb 1993.
- [85] J. J. Rocca, V. Shlyaptsev, F. G. Tomasel, O. D. Cortázar, D. Harts-horn, and J. L. A. Chilla. Demonstration of a discharge pumped table-top soft-x-ray laser. *Phys. Rev. Lett.*, 73(16):2192–2195, Oct 1994.
- [86] M. D. Rosen, P. L. Hagelstein, D. L. Matthews, E. M. Campbell, A. U. Hazi, B. L. Whitten, B. MacGowan, R. E. Turner, R. W. Lee, G. Charatis, Gar. E. Busch, C. L. Shepard, and P. D. Rockett. Exploding-foil technique for achieving a soft x-ray laser. *Phys. Rev. Lett.*, 54(2):106–109, Jan 1985.
- [87] B. Rus, T. Mocek, A. R. Präg, M. Kozlová, G. Jamelot, A. Carillon, D. Ros, D. Joyeux, and D. Phalippou. Multimilijoule, highly coherent x-ray laser at 21 nm operating in deep saturation through double-pass amplification. *Phys. Rev. A*, 66(6):063806, Dec 2002.
- [88] S. Sebban, R. Haroutunian, Ph. Balcou, G. Grillon, A. Rousse, S. Kazamias, T. Marin, J. P. Rousseau, L. Notebaert, M. Pittman, J. P. Chambaret, A. Antonetti, D. Hulin, D. Ros, A. Klisnick, A. Carillon, P. Jaeglé, G. Jamelot, and J. F. Wyart. Saturated amplification of a collisionally pumped optical-field-ionization soft x-ray laser at 41.8 nm. *Phys. Rev. Lett.*, 86(14):3004–3007, Apr 2001.
- [89] Toshizo Shirai, Yoshio Funatake, Kazuo Mori, Jack Sugar, Wolfgang L. Wiese, and Yohta Nakai. Spectral data and grotrian diagrams for highly ionized iron, fe viii-xxvi. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 19(1):127–275, 1990.
- [90] A. E. Siegman. *Lasers*. University Science Books, 1986.
- [91] Donna Strickland and Gerard Mourou. Compression of amplified chirped optical pulses. *Optics Communications*, 56(3), 1985.
- [92] S. Suckewer, C. H. Skinner, H. Milchberg, C. Keane, and D. Voorhees. Amplification of stimulated soft x-ray emission in a confined plasma column. *Phys. Rev. Lett.*, 55(17):1753–1756, Oct 1985.
- [93] Alain Sureau and Philip B. Holden. From amplification of spontaneous emission to saturation in x-ray lasers: A maxwell-bloch treatment. *Phys. Rev. A*, 52(4):3110–3125, Oct 1995.

- [94] Eiji Takahashi, Yasuo Nabekawa, and Katsumi Midorikawa. Generation of 10- μ m coherent extreme-ultraviolet light by use of high-order harmonics. *Opt. Lett.*, 27(21):1920–1922, 2002.
- [95] G J Tallents. The physics of soft x-ray lasers pumped by electron collisions in laser plasmas. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 36(15):R259, 2003.
- [96] O. Gilbaud *et al.* *Phys. Rev. A*, 2010. Accepted for publication.
- [97] F. G. Tomasel, J. J. Rocca, V. N. Shlyaptsev, and C. D. Macchietto. Lasing at 60.8 nm in ne-like sulfur ions in ablated material excited by a capillary discharge. *Phys. Rev. A*, 55(2):1437–1440, Feb 1997.
- [98] R. Tommasini, F. Löwenthal, and J. E. Balmer. Saturation in a ni-like pd soft-x-ray laser at 14.7 nm. *Phys. Rev. A*, 59(2):1577–1581, Feb 1999.
- [99] E. F. Toro. *Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 1999.
- [100] P. Velarde, D. García-Senz, E. Bravo, F. Ogando, A. Relano, C. García, and E. Oliva. Interaction of supernova remnants: From the circumstellar medium to the terrestrial laboratory. *Physics of Plasmas*, 13(9):092901, 2006.
- [101] P. Velarde and M. González. Modelo de dos temperaturas para arwen, 2008. Comunicación personal.
- [102] P. Velarde, F. Ogando, S. Eliezer, J.M. Martínez-Val, J.M. Perlado, and M. Murakami. Comparison between jet collision and shell impact concepts for fast ignition. *Laser and Particle Beams*, 23(01):43–46, 2005.
- [103] H. Wabnitz, A.R.B. de Castro, P. Görtler, T. Laarmann, W. Laasch, J. Schulz, and T. Möller. Multiple ionization of rare gas atoms irradiated with intense vuv radiation. *Phys. Rev. Lett.*, 94:023001, 2005.
- [104] Y. Wang, M. Berrill, F. Pedaci, M. M. Shakya, S. Gilbertson, Zenghu Chang, E. Granados, B. M. Luther, M. A. Larotonda, and J. J. Rocca. Measurement of 1-ps soft-x-ray laser pulses from an injection-seeded plasma amplifier. *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)*, 79(2):023810, 2009.

- [105] Y. Wang, E. Granados, M. A. Larotonda, M. Berrill, B. M. Luther, D. Patel, C. S. Menoni, and J. J. Rocca. High-brightness injection-seeded soft-x-ray-laser amplifier using a solid target. *Phys. Rev. Lett.*, 97:123901, 2006.
- [106] Y. Wang, E. Granados, F. Pedaci, D. Alessi, B. M. Luther, M. Berrill, and J. J. Rocca. Phase-coherent, injection-seeded, table-top soft-x-ray lasers at 18.9 nm and 13.9 nm. *Nature Photonics*, 2, 2008.
- [107] D. Whittaker, M. Fajardo, Ph. Zeitoun, J. Gautier, E. Oliva, S. Sebban, and P. Velarde. Producing ultrashort, ultraintense plasma-based soft x-ray laser pulses by high-harmonic seeding. *Phys. Rev. A*, 2010. Accepted for publication.
- [108] Barbara L. Whitten, Andrew U. Hazi, Mau H. Chen, and Peter L. Hagelstein. Effect of dielectronic recombination on the kinetics of neonlike selenium. *Phys. Rev. A*, 33(3):2171–2173, Mar 1986.
- [109] Ph. Zeitoun. Spectral amplification, 2010. Comunicación personal.
- [110] Ph. Zeitoun, G. Faivre, S. Sebban, T. Mocek, A. Hallou, M. Fajardo, D. Aubert, Ph. Balcou, F. Burgy, D. Douillet, S. Kazamias, G. de Lachèze-Muriel, T. Lefrou, S. le Pape, P. Mercère, H. Merdji, A. S. Morlens, J. P. Rousseau, and C. Valentin. A high-intensity highly coherent soft x-ray femtosecond laser seeded by a high harmonic beam. *Nature*, 431:427, 2004.
- [111] Ya. B. Zel'dovich and Yu. P. Raizer. *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. Dover Books, 2002.
- [112] J. Zhang, E. E. Fill, Y. Li, D. Schlögl, J. Steingruber, M. Holden, G. J. Tallents, A. Demir, P. Zeitoun, C. Danson, P. A. Norreys, F. Walsh, M. H. Key, C. L. S. Lewis, and A. G. McPhee. High-gain x-ray lasing at 11.1 nm in sodiumlike copper driven by a 20-j, 2-ps nd:glass laser. *Opt. Lett.*, 21(14):1035–1037, 1996.
- [113] J. Zhang, M. H. Key, P. A. Norreys, G. J. Tallents, A. Behjat, C. Danson, A. Demir, L. Dwivedi, M. Holden, P. B. Holden, C. L. S. Lewis, A. G. MacPhee, D. Neely, G. J. Pert, S. A. Ramsden, S. J. Rose, Y. F. Shao, O. Thomas, F. Walsh, and Y. L. You. Demonstration of high gain in a recombination xuv laser at 18.2 nm driven by a 20 j, 2 ps glass laser. *Phys. Rev. Lett.*, 74(8):1335–1338, Feb 1995.